

Ableitung der Raumgruppen
aus ihren klassengleichen
Untergruppenbeziehungen

von
Helmuth Zimmermann
aus Limbach/Sachsen



Digitized by the Internet Archive
in 2026

Ableitung der Raumgruppen aus ihren klassengleichen Untergruppenbeziehungen

Den Naturwissenschaftlichen Fachbereichen
der Friedrich-Alexander-Universität
Erlangen-Nürnberg
zur
Erlangung des Doktorgrades

vorgelegt von
Helmuth Zimmermann
aus Limbach/Sachsen

Als Dissertation genehmigt von den Naturwissenschaftlichen Fachbe-
reichen der Universität Erlangen-Nürnberg



Tag der mündlichen Prüfung

4. Februar 1976

Vorsitzender der kommissarischen
Promotionskommission

Prof. Dr. H. Remmert

Erstberichterstatte

Prof. Dr. H. Burzlaff

Zweitberichterstatte

Prof. Dr. K. Jacobs

Die vorliegende Arbeit entstand in der Zeit vom Februar 1973 bis Dezember 1975 am Lehrstuhl für Kristallographie der Universität Erlangen-Nürnberg.

Herrn Prof. Dr. H. Burzlaff danke ich für Anregungen, Kritik und Förderung. Auch Herrn Prof. Dr. K. Jacobs gilt mein Dank für sein Interesse an dieser Arbeit.

Inhalt

1. Grundbegriffe

- 1.1. Definition (regulär, reguläres Ptsyst., Gitter)
- 1.2. Definition (Symmetrieoperation)
- 1.3. Satz ($S=(R,T)$)
- 1.4. Bezeichnungen (rot.Anteil,transl.Anteil)
- 1.5. Rechenregeln
- 1.6. Definition (Punktgruppe, Raumgruppe)

2. Gitter und Wirkungsbereiche

- 2.1. DELAUNAY-Reduktion
- 2.2. Definition (Wirkungsbereich)
- 2.3. Eigenschaften von Wirkungsbereichen
- 2.4. Definition (konvex)
- 2.5. Beispiele
- 2.6. Wirkungsbereiche regulärer Punktsysteme
- 2.7. Definition (Inversion, zentrosymmetrisch)
- 2.8. Satz (Inversionszentren der Gitter)
- 2.9. Satz (Ist $M(\varphi,0)$ Polyed.fl., so ist $1/2 \in \text{Rdpt. v. } W(0)$)
- 2.10. Folgerung
- 2.11. Satz (Kriterium $\varphi^2 \rightarrow \varphi \in \varphi_0$)
- 2.12. Satz (Schar der Gitterbasis)
- 2.13. Folgerung
- 2.14. Definition (Basiskürzester Gittervektoren)
- 2.15. Bemerkung
- 2.16. Satz ($\varphi_1, \varphi_2, \varphi_3$ def. Flächen von $W(0)$)
- 2.17. Satz (raumdiagonale Fläche)
- 2.18. Satz (flächendiagonale Flächen)
- 2.19. Folgerung
- 2.20. Satz
- 2.21. Anmerkung (SELLING-Vierseit)

- 2.22. Satz
- 2.23. Zusammenfassung
- 2.24. Satz
- 2.25. Interpretation
- 2.26. Satz
- 2.27. Kantenzonen
- 2.28. Satz (Verschwinden von Kantenzonen)
- 2.29. Folgerung
- 2.30. Ergebnis (VORONOI-Typen)

3. Symmetriegruppen von Wirkungsbereichen

- 3.1. Bezeichnungen
- 3.2. Symmetrioperationen an Wirkungsbereichen
- 3.3. Satz (Invarianz des SELLING-Vierseits)
- 3.4. Symmetriebedingungen
- 3.5. Tabelle der SCHLEGEL-Diagramme
- 3.6. Tabelle der Symmetriebedingungen
- 3.7. Die Drehgruppen der Wirkungsbereiche
- 3.8. Kristallographische Blickrichtungen
- 3.9. Kristallographische Holoedrien
- 3.10. BRAVAIS-Gitter

4. Kristallographische Punktgruppen

- 4.1. Untergruppenbeziehungen der Holoedrien
- 4.2. Systemgleiche Untergruppen
- 4.3. HERMANN-MAUGUIN-Symbole der Punktgruppen
- 4.4. Triklone systemgleiche Untergruppen
- 4.5. Monokline systemgleiche Untergruppen
- 4.6. Orthorhombische systemgleiche Untergruppen
- 4.7. Rhomboedrische systemgleiche Untergruppen
- 4.8. Tetragonale systemgleiche Untergruppen
- 4.9. Hexagonale systemgleiche Untergruppen
- 4.10. Kubische systemgleiche Untergruppen
- 4.11. Untergruppenschema der Punktgruppen

5. Raumgruppenbeschreibung

- 5.1. Satz (Translationennormalteiler, rot.Anteile PG-Op.)
- 5.2. Bezeichnung (Kristallklasse)
- 5.3. Satz ($\mathcal{U} / \mathcal{T} \cong \text{Kristallklasse}$)
- 5.4. Folgerung (Lagekennstellenmatrix)
- 5.5. Äquivalente Raumgruppen
- 5.6. Erzeugung der Raumgruppenklassen aus Repräsentanten
- 5.7. Systemgruppen
- 5.8. Das Problem der Normalaufstellung
- 5.9. Geeignete Äquivalenzuntergruppen
- 5.10. Das Problem der Nullpunktwahl
- 5.11. Lagestellen- und Kennstellenvektor
- 5.12. HERMANN-MAUGUIN-Notation

6. Untergruppen der Raumgruppen

- 6.1. Zellengleiche und klassengleiche Untergruppen
- 6.2. Maximale Untergruppen
- 6.3. Untergruppendiagramme
- 6.4. Zellengleiche Untergruppen
- 6.5. Gittergruppen
- 6.6. Raumgruppen als klassengleiche Untergruppen der Gittergruppen
- 6.7. Untergruppentransformationen
- 6.8. Primtransformationen
- 6.9. Primtransformationen zwischen zentrierten Gittern
- 6.10. Untergruppentransformationen auf Raumgruppenmatrizen
- 6.11. Äquivalente Untergruppen
- 6.12. Dezentrierungen
- 6.13. Adjazenzmatrizen

7. Ableitung der Raumgruppenklassen

7.1. Triklone Kristallfamilie

7.2. Monokline Kristallfamilie

(a) Monokline Transformationshalbgruppen $m\tau$

(b) Primtransformationen

(c) Reduktion der Primtransformationen

7.3. Orthorhombische Kristallfamilie

(a) orthorhombische Transformationshalbgruppe $o\tau$

(b) Primtransformationen

(c) Reduktion der Primtransformationen

7.4. Tetragonale Kristallfamilie

(a) tetragonale Transformationshalbgruppe $t\tau$

(b) Primtransformationen und Reduktion

7.5. Rhomboedrisch-hexagonale Kristallfamilie

(a) Die Transformationshalbgruppe $rh\tau$

(b) Primtransformationen und Reduktion

7.6. Kubische Kristallfamilie

(a) Die Transformationshalbgruppe $c\tau$

(b) Primtransformationen

(c) Reduktion der Primtransformationen

1. Grundbegriffe

Die Gesetzmäßigkeiten, die bei der Untersuchung von Kristallen beobachtet wurden, gaben im Zusammenhang mit den in der neueren Naturwissenschaft aufkommenden Vorstellungen vom atomaren Aufbau der Materie schon sehr früh Anlaß zu Spekulationen über die Ordnungsprinzipien der Bausteine in kristallinen Stoffen. Als besonders fruchtbar erwies sich die Vorstellung von der gitterhaften Anordnung dieser Bausteine - sie konnte sehr gut erklären, wieso Kristallflächen nur in wenigen ausgezeichneten Richtungen auftreten. Die Gittertheorie wurde von BRAVAIS bearbeitet und durch die Experimente von M. v. LAUE, FRIEDRICH und KNIPPING durch den Nachweis von RÖNTGENstrahlinterferenzen bestätigt. Die Annahme, daß die Atome bzw. Moleküle einfach in Form von Raumgittern angeordnet seien, erwies sich allerdings als zu grob, um die Vielfalt der verschiedenen Kristalle zu erklären; vielmehr setzte sich die Vorstellung von dreidimensionalen "Tapetenmustern" durch, daß die Atome also endliche Raumstücke ausfüllen, die dreidimensional periodisch aneinandergereiht sind. Jede Sorte von Atomen bildet dann ein "reguläres Punktsystem" also eine dreidimensional periodische diskrete Punktanordnung in der die Nachbarschaften beliebiger Punkte des Punktsystems kongruent sind.

Das geometrische Interesse konzentrierte sich nun darauf, eine Übersicht über alle diese regulären Punktsysteme zu gewinnen. Das geschah in den Arbeiten von FEDOROW, SCHOENFLIES und NIGGLI, indem man die möglichen Symmetriegruppen regulärer Punktsysteme untersuchte und nach Auffindung dieser Gruppen auf einen beliebigen Punkt alle Symmetrioperationen wirken ließ und die so erzeugten regulären Punktsysteme, die sogenannten "Punktlagen" nach ihrer Symmetrie klassifizierte. Diese Punktlagen können anschließend nach ihrer geometrischen Ähnlichkeit in Klassen zusammengefaßt werden, die als Gitterkomplexe bezeichnet werden. Die spezielle Untersuchung solcher Gitterkomplexe

und ihrer Existenzbedingungen in Kristallstrukturen sowie geometrischer Verwandtschaften zwischen Gitterkomplexen ist ein Gegenstand der geometrischen Kristallchemie. Dazu gehören auch Untersuchungen, wann reguläre Punktsysteme Kugelpackungen bilden u.dgl.m.

Im folgenden soll dieser Weg nur soweit beschritten werden als die Symmetriegruppen der regulären Punktsysteme abgeleitet werden sollen. Die Ableitung der Punktlagen aus den Symmetriegruppen ist ohne Probleme und die Bildung der Gitterkomplexe kann ebenfalls "mechanisch" erfolgen. Von größerem Interesse sind dann erst wieder spezielle geometrische Untersuchungen der Gitterkomplexe.

Im ersten Abschnitt sollen die Grundbegriffe eingeführt und die für die technische Handhabung erforderlichen Sätze bereitgestellt werden. Dabei wird der Begriff der Gruppe, des Vektorraums und der starren Bewegung als bekannt vorausgesetzt. Auch auf eine Definition der Matrizenmultiplikation und des Determinantenbegriffs wird verzichtet, da dies auf den ersten Seiten jedes Buches über lineare Algebra und analytische Geometrie zu finden ist. Alle darüberhinaus gehende Sachverhalte werden bewiesen.

1.1. Definition

Eine Punktmenge P des dreidimensionalen Raums heißt regulär, wenn es eine Gruppe $\mathcal{G}(P)$ von starren Bewegungen gibt mit folgenden Eigenschaften:

- (1) Jede Operation $G \in \mathcal{G}(P)$ bildet P auf sich ab.
- (2) Zu jedem Paar von Punkten $(p, p') \in P \times P$ gibt es eine Operation $G \in \mathcal{G}(P)$, so daß $G(p) = p'$ ist.

Eine reguläre Punktmenge P des dreidimensionalen Raums heißt ein reguläres Punktsystem, wenn

- (3) $\inf_{\substack{p, p' \in P \\ p \neq p'}} d(p, p') = d_0 > 0$ ist, wenn $d(p, p')$ den euklidischen Abstand von p und p' bezeichnet

(4) $\mathcal{L}(P)$ enthält eine dreidimensionale Translationsuntergruppe $\mathcal{T}(P)$.

Ein reguläres Punktsystem Γ heißt ein Gitter, wenn für einen Punkt q $\Gamma = (T(q)/T \in \mathcal{T})$ für eine Translationsgruppe $\mathcal{T}$ ist, d. h. Γ besteht aus allen ganzzahligen Linearkombinationen der erzeugenden Translationsvektoren von $\mathcal{T}$.

1.2. Definition

Eine Symmetrieoperation soll im folgenden eine starre Bewegung des dreidimensionalen Raumes sein, die eine Punktmenge P auf sich abbildet. Sie heißt auch Symmetrieoperation der Menge P .

1.3. Satz:

Bezüglich einer festen Basis $\mathcal{B} = \{ \vec{b}_1, \vec{b}_2, \vec{b}_3 \}$ des dreidimensionalen Raumes läßt sich jede starre Bewegung S (und damit jede Symmetrieoperation) darstellen in der Form

$$S(X) = R X + T$$

wobei X das Koordinatentripel eines Punktes, R eine (3×3) -Matrix der Determinante $+1$ oder -1 ist und T das Koordinatentripel eines Translationsvektors.

Beweis:

Da S eine starre Bewegung ist und jede Translation ebenfalls, ist auch (da die starren Bewegungen eine Gruppe bilden)

$$\bar{S}(X) = S(X) - S(0)$$

eine starre Bewegung mit der Zusatzeigenschaft, daß

$$\bar{S}(0) = 0$$

ist. Ein Vektor

$$x = \sum_{i=1}^3 \vec{b}_i x^i = \mathcal{B} x$$

wird abgebildet auf einen Vektor

$$\begin{aligned}\tilde{x} &= \sum_{i=1}^3 \tilde{v}_i x^i = \tilde{B} x \\ &= \sum_{i=1}^3 \tilde{S}(\tilde{v}_i) x^i = \tilde{S}(\tilde{B}) x,\end{aligned}$$

denn, da die Bewegung starr ist und der Nullpunkt in Ruhe bleibt, bleibt auch die relative Lage der Projektionen von $\tilde{e}$ auf die Koordinatenachsen erhalten.

$\tilde{S}(\tilde{B})$ definiert aber eine Matrix R bzgl. der Basis $\tilde{B}$, wenn

$$r_j^i = s_i^j(\tilde{v}_j) \quad i, j \in \{1, 2, 3\}$$

ist, d.h. r_j^i ist die i -te Komponente des Bildes des j -ten Basisvektors unter S .

Daher ist

$$\tilde{S}(\tilde{B}) = \tilde{B} R$$

und

$$\tilde{x} = \tilde{B} \tilde{x} = \tilde{S}(\tilde{B}) x = \tilde{B} R x,$$

also

$$\tilde{x} = R x.$$

wegen der Starrheit von S bleibt insbesondere das Volumen V des von den Basisvektoren aufgespannten Parallelepipeds erhalten; deshalb ist $\det R = \pm V = \pm 1$.

Schließlich erhält man

$$S(x) = R x + S(0) = R x + T.$$

qed.

1.4. Bezeichnungen

Bezüglich einer festen Basis wird die Symmetrieoperation S eindeutig durch die Matrix R und das Koordinatentripel T bestimmt. Man schreibt daher

$$S = (R, T); \quad Sx = (R, T)x = R x + T$$

und nennt R den rotativen und T den translativen Anteil der Symmetrieeoperation S . Symmetrieeoperationen $S = (E, T)$ sind Translationen ($E = \text{Einheitsmatrix}$); ist $S = (R, 0)$ und $\det R = +1$, so ist S eine Drehung, ist $\det R = -1$, so spricht man von Drehinversionen.

1.5. Rechenregeln

Durch direktes Ausrechnen bestätigt man die Regeln:

$$(1) \quad S_2 \cdot S_1 = (R_2, T_2) (R_1, T_1) = (R_2 R_1, R_2 T_1 + T_2)$$

$$(2) \quad S^{-1} = (R^{-1}, -R^{-1}T),$$

wobei S_1 die Symmetrieeoperation ist, die zunächst auf das Koordinatentripel X angewendet wird.

1.6. Definition

Eine Gruppe $\mathcal{P}$ von Symmetrieeoperationen einer Punktmenge P heißt eine Punktgruppe, wenn es einen Punkt des Raumes gibt, der unter allen Operationen von $\mathcal{P}$ auf sich abgebildet wird.

Eine Punktgruppe $\mathcal{P}$ heißt kristallographische Punktgruppe, wenn ihre Symmetrieeoperationen ein vorgegebenes Gitter Γ auf sich abbilden.

Eine Symmetriegruppe $\mathcal{U}$ heißt eine Raumgruppe, wenn die Teilmenge $\mathcal{T}$ der Translationen von $\mathcal{U}$ ein dreidimensionales Gitter $\Gamma = \{T(0)/T \in \mathcal{T}\}$ definiert. (Ist die Menge Γ zwei- oder eindimensional, so spricht man von Schicht- bzw. Balkengruppen).

2. Gitter und Wirkungsbereiche

Im folgenden Abschnitt sollen nach Einführung der DELAUNAY-Reduktion als Normierungsverfahren für Gitterbasen, den Ideen von MINKOWSKI, VORONOI und DELAUNAY folgend, die Gitter durch ihre Wirkungsbereiche charakterisiert werden. Dabei wird ein neues analytisches Verfahren zur Ableitung verwendet. Die Resultate stimmen mit den von DELAUNAY gefundenen überein.

2.1. DELAUNAY-Reduktion

Jedes Gitter $\Gamma = \{ \sum_{i=1}^3 n^i \alpha_i \mid n^i \in \mathbb{Z} \}$ mit einer Gitterbasis $\mathcal{A} = \{ \alpha_1, \alpha_2, \alpha_3 \}$ hat unendlich viele Gitterbasen, da jede ganzzahlige Transformation $\tilde{\mathcal{A}} = \mathcal{A}T$ mit der Determinante ± 1 auf eine neue Gitterbasis führt. Die geometrischen Untersuchungen an Wirkungsbereichen von Gittern können erleichtert und insbesondere von Fallunterscheidungen befreit werden, wenn man nur Gitterbasen zuläßt, die zusätzliche Forderungen erfüllen. Die speziellen Ansprüche hängen von dem jeweils zu untersuchenden Problem ab, und in späteren Abschnitten, wo der Aspekt der Symmetriebetrachtung im Vordergrund steht, werden andere Prinzipien der Basiswahl zugeordnet. Im folgenden sollen Normierungsbedingungen beschrieben werden, die an die Wirkungsbereichsuntersuchung angepaßt sind. Solche Basen sollen DELAUNAY-reduzierte Basen genannt werden.

Ist $\mathcal{A} = \{ \alpha_1, \alpha_2, \alpha_3 \}$ eine Gitterbasis so wird zusätzlich die negative Raumdiagonale $\alpha_4 = -\alpha_1 - \alpha_2 - \alpha_3$ des Basisparallelepipeds betrachtet. An das Quadrupel $(\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3, \alpha_4)$ wird die DELAUNAY-Bedingung

$$\alpha_i \cdot \alpha_j \leq 0 \quad \forall \quad i, j \in \mathbb{N}^4, \quad i \neq j$$

($\mathbb{N}^4$ bezeichnet die Menge $\{1, \dots, 4\}$).

gestellt, d.h. die Winkel zwischen den Vektoren sollen mindestens 90° betragen. Für den metrischen Fundamentaltensor (Metriktensor)

$$G_{\star} := (g_{ij})_{i,j \in \mathbb{Z}_3} := (\alpha_i, \alpha_j)_{i,j \in \mathbb{Z}_3}$$

bedeutet dies, daß die Elemente außerhalb der Hauptdiagonalen null oder negativ sein müssen. Die Bedingung

$$\alpha_i, \alpha_k = -\alpha_i^2 - \alpha_i \alpha_j - \alpha_i \alpha_k \leq 0$$

$$\{i,j,k\} = \{1,2,3\}$$

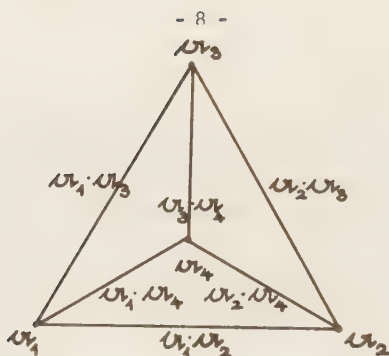
besagt, daß die Zeilen- bzw. Spaltensumme des Metriktensors stets größer oder gleich Null sein müssen. Da die Summe

$$\sum_{i,j=1}^3 g_{ij} = (\alpha_1 + \alpha_2 + \alpha_3)^2 > 0$$

ist (da $\mathcal{A}$ eine linear unabhängige Menge ist), muß außerdem wenigstens eine Zeilen- und Spaltensumme echt größer als null sein.

Daß man zu jeder Gitterbasis eine DELAUNAY-reduzierte Basis finden kann, ergibt sich aus dem folgenden Verfahren der DELAUNAY-Reduktion.

Zur Beschreibung des Verfahrens bedient man sich des SELLINGSchen Vierseits; das ist die orthogonale Projektion der Kanten eines Tetraeders in die Ebene einer Tetraederfläche. Jeder Eckpunkt dieses Vierseits entspricht einem der Vektoren $\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3, \alpha_4$ und jede Kante zwischen der Ecke von α_i und α_j dem Skalarprodukt α_i, α_j .



Für die Basis $\mathcal{A}$ berechnet man die Zahlenwerte auf den Kanten etwa aus der Formel

$$v_i v_j = |v_i| \cdot |v_j| \cos \angle(v_i, v_j)$$

und

$$v_i v_4 = -v_i^2 - v_i v_j - v_i v_k$$

$$(i, j, k) = \mathbb{L}^3$$

Sind dann die Zahlenwerte auf den Kanten sämtlich null oder negativ, so ist die Basis DELAUNAY-reduziert. Ist eines der Skalarprodukte $v_i v_j > 0$, so wird eine Basistransformation $\mathcal{A} \rightarrow \tilde{\mathcal{A}}$ vorgenommen bei der der vierte Vektor entsprechend mittransformiert wird:

$$\tilde{v}_k = -v_k, \tilde{v}_i = v_i, \tilde{v}_j = v_j + v_k \quad (j \neq k, j \neq i) \quad j \in \mathbb{L}^4.$$

bei Iteration

Um einzusehen, daß dieses Verfahren stets auf eine DELAUNAY-reduzierte Zelle führt, betrachtet man die folgende reelle Funktion, die für beliebige Vektorquadrupel erklärt ist:

$$\sigma(v_1, v_2, v_3, v_4) = \sum_{i=1}^4 v_i^2.$$

Diese Funktion ist stets positiv, und für jedes Gitter Γ gibt

es zu jeder reellen Zahl $\tau > 0$ nur endlich viele Quadrupel $(\alpha_1, \dots, \alpha_4)$, so daß $\sigma(\alpha_1, \dots, \alpha_4) < \tau$ ist, da in der Kugel um den Nullpunkt vom Radius $\sqrt{\tau}$ nur endlich viele Gittervektoren enthalten sind.

Bei Anwendung der DELAUNAY-Reduktion auf ein Quadrupel $\alpha = (\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3, \alpha_4)$ entsteht ein Quadrupel $\tilde{\alpha} = (\tilde{\alpha}_1, \tilde{\alpha}_2, \tilde{\alpha}_3, \tilde{\alpha}_4)$ mit $\sigma(\tilde{\alpha}) < \sigma(\alpha)$, denn

$$\begin{aligned}\sigma(\tilde{\alpha}) &= \sum_{i=1}^4 \tilde{\alpha}_i^2 = \tilde{\alpha}_k^2 + \tilde{\alpha}_1^2 + \sum_{j \neq k, 1} (\alpha_j + \alpha_k)^2 \\ &= \alpha_k^2 + \alpha_1^2 + \sum_{j \neq k, 1} (\alpha_j^2 + 2\alpha_j\alpha_k + \alpha_k^2) \\ &= \sum_{i=1}^4 \alpha_i^2 + 2\alpha_k \left(\sum_{j \neq k, 1} \alpha_j \right) + \alpha_k^2 \\ &= \sigma(\alpha) + 2\alpha_k \sum_{j \neq 1} \alpha_j = \sigma(\alpha) - 2\alpha_k \alpha_1 \\ &< \sigma(\alpha), \text{ da } \alpha_k \alpha_1 > 0 \text{ war.}\end{aligned}$$

Solange noch eines der Skalarprodukte positiv ist, läßt sich der Reduktionsprozeß fortsetzen, andererseits gibt es nur endlich viele Quadrupel mit $\sigma(\tilde{\alpha}) < \sigma(\alpha)$, also muß das Verfahren mit einer DELAUNAY-reduzierten Basis aufhören.

Die besondere Beziehung dieser Basen zu den Wirkungsbereichen der Gitter wird sich im Laufe der folgenden Untersuchungen zeigen.

2.2. Definition

Ist P eine diskrete Menge von Punkten des dreidimensionalen Raumes, d.h. ist $\inf_{y \neq y' \in P} d(y, y') = d_0 > 0$, so ist der Wirkungsbereich $H(y)$ von $y \in P$ die Menge aller Punkte $\mathcal{C}$ des Raumes mit

$$d(y, \mathcal{C}) < d(y', \mathcal{C}) \quad \forall y' \in P \setminus \{y\}.$$

2.3. Eigenschaften von Wirkungsbereichen

- (1) Da $\inf_{y \neq y' \in P} d(y, y') = d_0 > 0$ ist,

ist jeder Wirkungsbereich nicht-leer, da wenigstens $y \in H(y)$ ist.

- (2) Für jedes Paar $(y, y') \in P \times P$ ist die Menge aller Punkte $\mathcal{C}$ mit $d(y, \mathcal{C}) = d(y', \mathcal{C})$ eine Ebene, beschrieben durch die Gleichung

$$(\mathcal{C} - y)^2 = (\mathcal{C} - y')^2$$

bzw.

$$(\mathcal{C} - 1/2(y + y')) \cdot (y - y') = 0.$$

Das ist die Ebene, die senkrecht auf der Verbindungslinie $\overline{yy'}$ steht und durch den Mittelpunkt dieser Strecke verläuft, also die mittelsenkrechte Ebene $M(y, y')$.

- (3) Aufgrund der vorangehenden Überlegungen ist die Menge aller Punkte $\mathcal{C}$ mit $d(y, \mathcal{C}) < d(y', \mathcal{C})$ für das Paar (y, y') gerade der Halbraum $H(y, y') = \{\mathcal{C} \mid (\mathcal{C} - 1/2(y + y')) \cdot (y - y') < 0\}$ (Man rechnet dies sofort nach).

Also ist der Wirkungsbereich von y der Durchschnitt

$$H(y) = \bigcap_{\substack{y' \in P \\ y' \neq y}} H(y, y').$$

2.4. Definition

Eine Punktmenge K heißt konvex, wenn mit je zwei Punkten e und e' aus K auch die Verbindungsline

$$\{z: z = \alpha e + (1-\alpha)e', \alpha \in [0,1]\}$$

zu K gehört.

2.5. Beispiele

(1) $H(y, y')$ ist konvex; denn ist

$$(e - 1/2(y + y'))(y - y') < 0 \quad \text{und}$$

$$(e' - 1/2(y + y'))(y - y') < 0, \quad \text{so ist}$$

$$\begin{aligned} & (\alpha e + (1-\alpha)e' - 1/2(y + y'))(y - y') \\ &= \alpha(e - 1/2(y + y'))(y - y') \\ &+ (1-\alpha)(e' - 1/2(y + y'))(y - y') < 0, \end{aligned}$$

da beide Summanden kleiner oder gleich null sind und mindestens einer echt kleiner.

(2) Der nicht-leere Durchschnitt beliebiger konvexer Mengen ist konvex, denn liegt die Verbindungsgerade zweier Punkte aus dem Durchschnitt in jeder der zum Durchschnitt beitragenden Mengen, so auch im Durchschnitt.

(3) Aus (1) und (2) folgt, daß Wirkungsbereiche grundsätzlich konvex sind.

2.6. Wirkungsbereiche regulärer Punktsysteme

Ist P ein reguläres Punktsystem, so ist P jedenfalls eine diskrete Punktmenge und somit ist für jeden Punkt ein Wirkungsbereich erklärt. Da die Nachbarschaften aller Punkte von P kongruent sind,

sind wegen der Wirkungsbereichskonstruktion in 2.2.(3) alle Wirkungsbereiche kongruent. Sie definieren daher reguläre konvexe Parkettierungen des dreidimensionalen Raumes. Abgesehen von speziellen kubischen Punktsystemen (FISCHER, KOCH) sind bisher nur die Wirkungsbereiche der Punktgitter vollständig untersucht. Für sie soll hier eine neue Ableitung angegeben werden. Wegen der Kongruenz der Wirkungsbereiche genügt es, die Untersuchung für den Wirkungsbereich des Nullpunkts durchzuführen. Die Wirkungsbereiche von Gitterpunkten müssen Polyeder sein, da die mittelsenkrechten Ebenen mit den positiven und negativen Basisvektoren des Gitters jedenfalls ein Parallelepipèd definieren, das den Wirkungsbereich enthält. Dieses Parallelepipèd hat endlichen Durchmesser. Alle ganz- oder halbzahligen Gittervektoren, deren Länge den Durchmesser des Parallelepipèds übersteigt, können nicht Mittelpunkte von Grenzflächen des Wirkungsbereichs sein. Also können nur endlich viele mittelsenkrechte Flächen die Oberfläche des Wirkungsbereichs tangieren. Also ist der Wirkungsbereich ein Polyeder. Die topologischen Eigenschaften dieser Polyeder sollen zunächst untersucht werden.

2.7. Definition

Die Symmetrieoperation $((-1) E, T)$ heißt Inversion am Punkt $1/2 T$ und jede Punktmenge, die dieser Operation genügt heißt zentrosymmetrisch zum Symmetriezentrum in $1/2 T$.

($1/2 T$ ist Fixpunkt der Inversion:

$$((-1) E, T) \ 1/2 T = (-1) E \ 1/2 T + T = -1/2 T + T = 1/2 T).$$

2.8. Satz

Ist $\Gamma = \left\{ \sum_{i=1}^3 n^i \alpha_i \mid n^i \in \mathbb{Z}, \{\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3\} \text{ Basis} \right\}$

ein Gitter, so befinden sich in allen Punkten

$$z = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^3 n^i \alpha_i$$

Inversionszentren von Γ .

Beweis

Die Abbildung

$$G \longrightarrow -G + \begin{pmatrix} n^1 \\ n^2 \\ n^3 \end{pmatrix}$$

ist eine Symmetrieoperation des Gitters

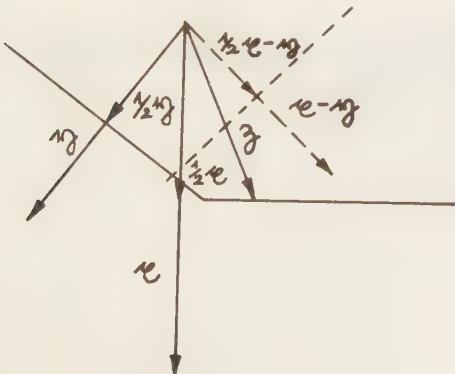
qed.

2.9. Satz:

Ist $M(e, 0)$ Polyederfläche des Wirkungsbereichs $W(0)$, so ist $\frac{1}{2}e$ Randpunkt des Polyeders $W(0)$.

Beweis:

Annahme: $M(e, 0)$ sei Polyederfläche und $z \in M(e, 0)$ sei Polyeder-
randpunkt im Inneren der Polyederfläche (also auf keiner
Kante) und $\frac{1}{2}e$ sei kein Polyederrandpunkt.



Nach Voraussetzung liegt γ auf $U(\xi, 0)$ und genügt daher der Gleichung der Ebene $H(\xi, 0)$:

$$(a) (\gamma - 1/2 \xi) \xi = 0$$

Da γ zum Wirkungsbereich $H(0)$ gehört, kann es keinen Gittervektor $\mu \in \Lambda$ geben, dessen mittelsenkrechte Ebene $U(\mu, 0)$ den Punkt vom Nullpunkt trennt. Da γ auf keiner Kante liegen soll, darf γ auch keine weitere Ebenengleichung für $U(\mu, 0)$ erfüllen, wenn $\mu \neq \xi$ ist. Also gilt für alle $\mu \neq \xi$:

$$(b) (\gamma - 1/2 \mu) \mu < 0.$$

Da der Punkt $1/2 \xi$ nicht zu $H(0)$ gehört, muß es einen Gittervektor η und eine zugehörige Ebene $U(\eta, 0)$ geben, so daß γ und $1/2 \xi$ durch $U(\eta, 0)$ getrennt werden. Gäbe es nämlich keine solche Ebene, so läge $1/2 \xi$ im Durchschnitt aller Halbräume $H(0, \mu)$ und gehörte zu $H(0)$. Also gilt

$$(c) (1/2 \xi - 1/2 \eta) \eta \geq 0.$$

Die folgende Rechnung zeigt, daß dann der neben ξ und η ebenfalls vorhandene Gittervektor $\xi - \eta$ eine Ebene $U(\xi - \eta, 0)$ bestimmt, die γ von 0 trennt - im Widerspruch zu (2).

Es ist nämlich

$$\begin{aligned} & (\gamma - 1/2 (\xi - \eta)) (\xi - \eta) \\ &= \underbrace{(\gamma - 1/2 \xi) \xi}_{= 0 \text{ nach (a)}} - \gamma \eta + 1/2 \xi \eta + 1/2 (\xi - \eta) \eta \\ &= -(\gamma - 1/2 \eta) \eta + 1/2 (\xi - \eta) \eta + 1/2 (\xi - \eta) \eta \\ &= \underbrace{-(\gamma - 1/2 \eta) \eta}_{\geq 0 \text{ nach (b)}} + \underbrace{(\xi - \eta) \eta}_{\geq 0 \text{ nach (c)}} \end{aligned}$$

also

$$(z - 1/2(\xi - \eta))(\xi - \eta) > 0.$$

im Widerspruch zu (b).

Also muß $1/2 \xi$ Polyederrandpunkt sein, wenn $M(\xi, 0)$ Polyederfläche ist.

qed.

2.10. Folgerung

Aus 2.8. und 2.9. erhält man folgende Resultate:

- (1) Jeder Wirkungsbereich eines Gitterpunktes ist zentrosymmetrisch, da jeder Gitterpunkt ein Symmetriezentrum ist.
- (2) Jede Fläche eines Wirkungsbereichs ist zentrosymmetrisch, da der auf ihr liegende Punkt $1/2\xi$ ein Symmetriezentrum enthält.

2.11. Satz (Kriterium)

Die mittelsenkrechte Fläche $M(\xi, 0)$ definiert genau dann eine Fläche am Wirkungsbereich $W(0)$ des Nullpunkts, wenn für beliebige Gittervektoren $\xi \neq 0$, $\eta \neq \xi_0$ die Ungleichung

$$\xi \cdot \eta > \xi \cdot \xi_0 \text{ gilt} \\ (\text{bzw. } (\xi - \xi_0) \cdot \eta > 0).$$

Beweis:

Nach 2.9. ist $M(\xi, 0)$ genau dann Polyederfläche, wenn für beliebige Gittervektoren η der Punkt $1/2 \xi$ und 0 in $H(0, \eta)$ liegen, wenn also

$$(1/2 \xi - 1/2 \xi) \cdot \eta \leq 0$$

ist für beliebige Gittervektoren φ , also

$$(\varphi - \varphi_0) \varphi > 0.$$

qed.

2.12. Satz:

Ein Gittervektor φ kann höchstens dann eine Fläche am Wirkungsbereich $W(0)$ definieren, wenn er bzgl. einer DELAUNAY-reduzierten Gitterbasis nur Koordinaten 0, +1 oder -1 hat. Die Menge S dieser Vektoren heiÙe Schar des Achsenkreuzes der reduzierten Zelle.

Beweis:

Es sei

$$\varphi_0 = \begin{pmatrix} x_0^1 \\ x_0^2 \\ x_0^3 \end{pmatrix} \quad \text{ein beliebiger Gittervektor}$$

und

$$\varphi = \begin{pmatrix} \text{sign}(x_0^1) \\ \text{sign}(x_0^2) \\ \text{sign}(x_0^3) \end{pmatrix}$$

$$\text{wobei } \text{sign}(x) = \begin{cases} +1, & \text{falls } x > 0 \\ 0, & \text{" } x = 0 \\ -1, & \text{" } x < 0 \end{cases} \text{ ist.}$$

Dann gilt

$$\begin{aligned} (\varphi - \varphi_0) \varphi &= \sum_{i,j} g_{ij} (\text{sign}(x_0^i) - x_0^i) \text{sign}(x_0^j) \\ &= \sum_{i,j} g_{ij} (1 - |x_0^i|) \text{sign}(x_0^i) \text{sign}(x_0^j) \\ &= \sum_i (1 - |x_0^i|) \sum_j g_{ij} \text{sign}(x_0^i) \text{sign}(x_0^j) \end{aligned}$$

Ist $x_0^i = 0$,

so ist $\sum_j g_{ij} \operatorname{sign}(x_0^i) \operatorname{sign}(x_0^j) = 0$;

ist $x_0^i = \pm 1$,

so ist $(1 - |x_0^i|) = 0$;

ist $|x_0^i| > 1$, so ist

$$\underbrace{(1 - |x_0^i|)}_{< 0} \underbrace{\sum_j g_{ij} \operatorname{sign}(x_0^i) \operatorname{sign}(x_0^j)}_{\geq \sum_j g_{ij} \geq 0} \leq 0$$

DELAUNAY

Also kann $\mathcal{C}_0$ höchstens dann eine Fläche von $W(0)$ bestimmen, wenn $\mathcal{C} = \mathcal{C}_0$ ist.

qed.

2.13. Folgerung

Das Problem, die Flächen des Wirkungsbereichs $W(0)$ zu finden, ist damit auf das endliche Problem zurückgeführt, welcher der 26 Vektoren aus $\{0, 1, -1\}^3 \setminus \{(0, 0, 0)\}$ bezüglich einer DELAUNAY-reduzierten Basis eine Fläche bestimmen kann. Wegen der Zentrosymmetrie müssen nur 13 untersucht werden, nämlich

$$\{ \mathcal{C}_1, \mathcal{C}_2, \mathcal{C}_3, \mathcal{C}_1 + \mathcal{C}_2, \mathcal{C}_1 - \mathcal{C}_2, \mathcal{C}_2 + \mathcal{C}_3, \mathcal{C}_2 - \mathcal{C}_3, \\ \mathcal{C}_1 + \mathcal{C}_3, \mathcal{C}_1 - \mathcal{C}_3, \mathcal{C}_1 + \mathcal{C}_2 + \mathcal{C}_3, -\mathcal{C}_1 + \mathcal{C}_2 + \mathcal{C}_3, \\ \mathcal{C}_1 - \mathcal{C}_2 + \mathcal{C}_3, \mathcal{C}_1 + \mathcal{C}_2 - \mathcal{C}_3 \}$$

2.14. Definition

Eine Gitterbasis $\mathcal{B} = \{b_1, b_2, b_3\}$ eines Gitters Γ heißt eine Basis kürzester Gittervektoren, wenn $|b_1| \leq |u| \forall u \in \Gamma$, $|b_2| \leq |u| \forall u \in \Gamma \setminus \{n^1 b_1 \mid n^1 \in \mathbb{Z}\}$ und $|b_3| \leq |u| \forall u \in \Gamma \setminus \{n^1 b_1 + n^2 b_2 \mid n^1, n^2 \in \mathbb{Z}\}$.

2.15. Bemerkung

In jedem Gitter Γ gibt es mindestens eine Basis kürzester Gittervektoren, da für jede Zahl $g \geq 0$ nur endlich viele Gittervektoren in der Kugel $K_g(0)$ mit Radius g um den Nullpunkt liegen.

2.16. Satz

Ist $\mathcal{B} = \{b_1, b_2, b_3\}$ eine Basis kürzester Gittervektoren, so definieren b_1, b_2 und b_3 stets Flächen von $W(0)$.

Beweis

Es ist $|u| \geq |b_1| \forall u \in \Gamma$

$$\Rightarrow u^2 = |u|^2 \geq |b_1|^2 \geq |b_1| |u| \cos(\hat{b}_1, u) = |b_1| |u|$$

Dabei ist eines der beiden Ungleichheitszeichen strikt, da entweder $\cos(\hat{b}_1, u) \neq 1$ ist oder für $u \neq b_1$ und $\cos(\hat{b}_1, u) = 1$ $|u| > |b_1|$ gilt. $\Rightarrow b_1$ bestimmt eine Fläche.

Ist $u \in \Gamma \setminus \{n^1 b_1 \mid n^1 \in \mathbb{Z}\}$ so gilt

$$|u| \geq |b_2| \text{ und es folgt}$$

$$u^2 \geq |b_2| |u| \text{ wie oben.}$$

Ist $\mathcal{C}_1 = n^1 b_1$, so ist $2n^1 b_1 - b_2 \in \Gamma \setminus \{n^1 b_1 | n^1 \in \mathbb{Z}\}$
und somit

$$(2n^1 b_1 - b_2)^2 \geq b_2^2, \text{ also}$$

$$4(n^1)^2 b_1^2 - 4n^1 b_1 b_2 + b_2^2 \geq b_2^2$$

und deshalb

$$(n^1 b_1)^2 \geq (n^1 b_1) b_2.$$

Ist

$$(n^1 b_1)^2 = (n^1 b_1) b_2, \text{ so ist}$$

$$\begin{aligned} (n^1 b_1 - b_2)^2 &= (n^1 b_1)^2 - 2(n^1 b_1) b_2 + b_2^2 \\ &= b_2^2 - (n^1 b_1)^2 < b_2^2, \text{ wenn } n^1 b_1 \neq 0. \end{aligned}$$

im Widerspruch zu

$$|b_2| \leq |n^1 b_1 - b_2|.$$

Ist schließlich $\mathcal{C} \in \Gamma \setminus \{n^1 b_1 + n^2 b_2 | n^1, n^2 \in \mathbb{Z}\}$,

so ist $|\mathcal{C}| \geq |b_3|$ und die Ungleichung folgt wie oben.

Nach Voraussetzung ist

$$(2(n^1 b_1 + n^2 b_2) - b_3)^2 \geq b_3^2,$$

also

$$4(n^1 b_1 + n^2 b_2)^2 - 4(n^1 b_1 + n^2 b_2) b_3 + b_3^2 \geq b_3^2$$

d. h. jedenfalls

$$(n^1 b_1 + n^2 b_2)^2 \geq (n^1 b_1 + n^2 b_2) b_3$$

Ist

$$(n^1 b_1 + n^2 b_2)^2 = (n^1 b_1 + n^2 b_2) b_3, \text{ so folgt}$$

$$\begin{aligned} (n^1 b_1 + n^2 b_2 - b_3)^2 &= (n^1 b_1 + n^2 b_2)^2 - 2(n^1 b_1 + n^2 b_2) b_3 + b_3^2 \\ &= b_3^2 - (n^1 b_1 + n^2 b_2)^2 < b_3^2 \\ &\text{wenn } n^1 b_1 + n^2 b_2 \neq 0 \end{aligned}$$

im Widerspruch zu

$$(n^1 b_1 + n^2 b_2 - b_3)^2 \geq b_3^2.$$

qed.

2.17. Satz

Von den raumdiagonalen Vektoren bzgl. einer DELAUNAY reduzierten Basis können nur $\pm (b_1 + b_2 + b_3)$ eine Fläche zum Wirkungsbereich $W(0)$ beitragen.

Beweis

Es sei $\mathcal{C}_0$ gegeben durch $x_0^i = -1, x_0^j = x_0^k = +1$

und $\mathcal{C}$ durch $x^i = -1, x^j = x^k = 0$. Dann ist

$$\begin{aligned} &\mathcal{C} \cdot (\mathcal{C} - \mathcal{C}_0) \\ &= \sum_{i,m} g_{im} x^i (x^m - x_0^m) \\ &= - \sum_m g_{im} (x^m - x_0^m) \\ &= -g_{ii} \underbrace{(x^i - x_0^i)}_{=0} + g_{ij} x_0^j + g_{ik} x_0^k \\ &= g_{ij} + g_{ik} \leq 0 \text{ wegen DELAUNAY-Reduktion.} \end{aligned}$$

qed.

2.18. Satz

Von den flächendiagonalen Vektoren bzgl. einer DELAUNAY-reduzierten Basis können nur die $\mathcal{L}_i + \mathcal{L}_j$ eine Fläche von $W(0)$ definieren, nicht jedoch die $\mathcal{L}_i - \mathcal{L}_j$.

Beweis

Es sei $\mathcal{U}$ gegeben durch

$$x_0^i = -1, x_0^j = +1, x_0^k = 0,$$

$\mathcal{U}$ durch

$$x^i = -1, x^j = x^k = 0.$$

Dann ist

$$\begin{aligned} \mathcal{U}(\mathcal{U} - \mathcal{U}_0) &= \sum_{l,m} g_{lm} x^l (x^m - x_0^m) \\ &= -\sum_m g_{im} (x^m - x_0^m) \end{aligned}$$

$$= 0 \cdot g_{ii} - g_{ij}(-1) - 0 \cdot g_{ik} = g_{ij} \leq 0$$

wegen DELAUNAY-Reduktion,

qed.

2.19. Folgerungen

(1) Bzgl. einer DELAUNAY-reduzierten Basis können nur die Vektoren aus

$$S_F = \{\pm \mathcal{L}_1, \pm \mathcal{L}_2, \pm \mathcal{L}_3, \pm(\mathcal{L}_1 + \mathcal{L}_2), \pm(\mathcal{L}_2 + \mathcal{L}_3), \pm(\mathcal{L}_3 + \mathcal{L}_1), \pm(\mathcal{L}_1 + \mathcal{L}_2 + \mathcal{L}_3)\}$$

Flächen am $W(0)$ bestimmen.

- (2) $W(0)$ kann höchstens 14 Flächen besitzen.
- (3) Da eine Basis kürzester Gittervektoren stets Flächen an $W(0)$ bestimmt, muß in S_F eine solche Basis enthalten sein.
- (4) Aus den Sätzen 2.12 - 2.18. ergibt sich, daß es genügt, die Ungleichung $\mathcal{L}(\mathcal{U} - \mathcal{U}_0) > 0$ für $\mathcal{U} \in S_F$ zu überprüfen, da eine Fläche $M(\mathcal{U}_0)$ höchstens dann eine Wirkungsbereichsfläche sein kann, wenn ihr Mittelpunkt $1/2 \mathcal{U}$ in allen 14 Halbräumen liegt.
- Weiter genügt es, diejenigen $\mathcal{U} \in S_F$ zu untersuchen, für die $\mathcal{L}\mathcal{U} > 0$ ist, weil sonst $\mathcal{L}(\mathcal{U} - \mathcal{U}_0) > 0$ trivial ist.

2.20. Satz

Der Basisvektor $i\mathcal{U}_i$ in der DELAUNAY-reduzierten Zelle bestimmt genau dann keine Fläche von $W(0)$, wenn entweder

$$\mathcal{L}\mathcal{U}_k \mathcal{U}_4 = \mathcal{L}\mathcal{U}_j \mathcal{U}_4 = 0 \quad \text{ist}$$

oder

$$\mathcal{L}\mathcal{U}_k \mathcal{L}\mathcal{U}_j = i\mathcal{U}_j i\mathcal{U}_4 = 0.$$

Beweis

$$(-\mathcal{U}_j) \mathcal{U}_i \geq 0:$$

$$(-\mathcal{U}_j) (-\mathcal{U}_j - \mathcal{U}_i) = -\mathcal{U}_j (\mathcal{U}_4 + \mathcal{U}_k) \geq 0$$

$$"=0" \Leftrightarrow \mathcal{L}\mathcal{U}_j \mathcal{U}_4 = \mathcal{L}\mathcal{U}_k \mathcal{U}_j = 0$$

$$(i\mathcal{U}_i + \mathcal{U}_j) \mathcal{U}_i = -\mathcal{U}_4 \mathcal{U}_i - \mathcal{U}_k \mathcal{U}_i \geq 0:$$

$$(\mathcal{U}_i + \mathcal{U}_j) (\mathcal{U}_i + \mathcal{U}_j - \mathcal{U}_i) = (\mathcal{U}_i + \mathcal{U}_j) \mathcal{U}_j$$

$$= (-\mathcal{U}_4 - \mathcal{U}_k) \mathcal{U}_j \geq 0$$

$$"=0" \Leftrightarrow i\mathcal{U}_j \mathcal{U}_4 = \mathcal{L}\mathcal{U}_k \mathcal{U}_j = 0$$

$$(-\mathcal{L}v_j - \mathcal{L}v_k) \mathcal{L}v_i \geq 0:$$

$$(-\mathcal{L}v_j - \mathcal{L}v_k) (-\mathcal{L}v_j - \mathcal{L}v_k - \mathcal{L}v_i)$$

$$= (-\mathcal{L}v_j - \mathcal{L}v_k) \mathcal{L}v_i \geq 0$$

$$"=0" \Leftrightarrow \mathcal{L}v_j \mathcal{L}v_i = \mathcal{L}v_k \mathcal{L}v_i = 0$$

$$(-\mathcal{L}v_i) \mathcal{L}v_i \geq 0:$$

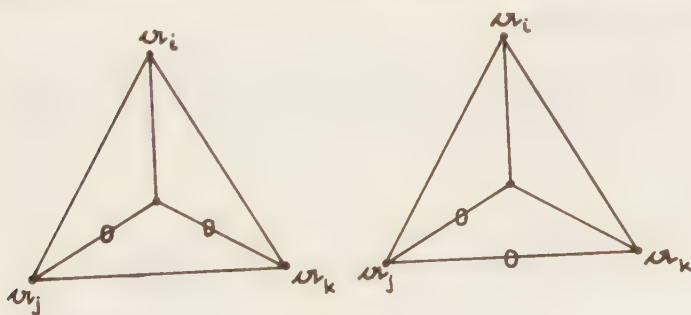
$$(-\mathcal{L}v_i) (-\mathcal{L}v_i - \mathcal{L}v_j) = -\mathcal{L}v_i (\mathcal{L}v_j + \mathcal{L}v_k) \geq 0$$

$$"=0" \Leftrightarrow \mathcal{L}v_j \mathcal{L}v_i = \mathcal{L}v_k \mathcal{L}v_i = 0.$$

qed.

2.21. Anmerkung

Satz 2.20 betrifft die SELLING-Vierseite des folgenden Typs:



2.22. Satz

Der Vektor $\mathcal{L}v_i$ der DELAUNAY-Zelle definiert genau dann keine Fläche von $W(0)$ wenn

$$\mathcal{L}v_i \mathcal{L}v_j = \mathcal{L}v_i \mathcal{L}v_k = 0$$

für zwei Skalarprodukte gilt.

Beweis:

$$(-\mathcal{U}_i) \mathcal{U}_4 \geq 0:$$

$$(-\mathcal{U}_i) (-\mathcal{U}_j - \mathcal{U}_4) = -\mathcal{U}_i (\mathcal{U}_j + \mathcal{U}_k) \geq 0$$

$$"=0" \iff \mathcal{U}_i \mathcal{U}_j = \mathcal{U}_i \mathcal{U}_k = 0.$$

$$(-\mathcal{U}_i - \mathcal{U}_j) \mathcal{U}_4 \geq 0:$$

$$(-\mathcal{U}_i - \mathcal{U}_j) (-\mathcal{U}_i - \mathcal{U}_j - \mathcal{U}_4) = (-\mathcal{U}_i - \mathcal{U}_j) \mathcal{U}_k \geq 0$$

$$"=0" \iff \mathcal{U}_i \mathcal{U}_k = \mathcal{U}_j \mathcal{U}_k = 0.$$

qed.

2.23. Zusammenfassung

Ein Vektor $\mathcal{U}_i$ ($i \in \mathcal{L}^+$) definiert genau dann keine Fläche von $W(0)$, wenn im SELLING-Vierseit an der Gegenfläche von $\mathcal{U}_i$ zwei Kanten eine Null tragen.

2.24. Satz

Ein flächendiagonaler Vektor $\mathcal{U}_i + \mathcal{U}_j$ der DELAUNAY-Zelle definiert genau dann keine Fläche von $W(0)$, wenn entweder

$$\mathcal{U}_i \mathcal{U}_j = 0$$

oder

$$\mathcal{U}_k \mathcal{U}_4 = 0 \quad \text{ist.}$$

Beweis:

$$\wedge v_i (v_i + v_j) = v_i (-v_4 - v_k) \geq 0:$$

$$v_i (v_i - v_i - v_j) = -v_i v_j \geq 0$$

$$"=0" \iff v_i v_j = 0$$

$$(-v_4) (v_i + v_j) \geq 0:$$

$$-v_4 (-v_4 - v_i - v_j) = -v_4 v_k \geq 0$$

$$"=0" \iff v_4 v_k = 0$$

$$(v_i + v_k) (v_i + v_j)$$

$$= v_i^2 + v_i v_k + v_i v_j + v_j v_k$$

$$= v_i (v_i + v_j) + (v_i + v_j) v_k$$

$$= v_i (-v_4 - v_k) + (v_i + v_j) v_k$$

$$= -v_i v_4 + v_j v_k$$

$$1. \text{ Fall: } v_j v_k \geq v_i v_4$$

$$\Rightarrow (v_i + v_k) (v_i + v_k - v_i - v_j)$$

$$= (v_i + v_k) (v_k - v_j)$$

$$= (-v_4 - v_j) v_k - v_j (v_i + v_k) \geq 0$$

$$"=0" \iff v_k v_4 = v_i v_j = v_k v_j = 0$$

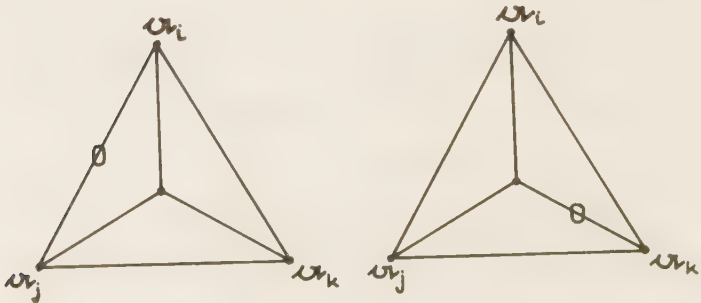
2. Fall: $\omega_j \omega_k < \omega_i \omega_4$

$$\begin{aligned}
 & (-\omega_i - \omega_k) (-\omega_i - \omega_k - \omega_j - \omega_4) \\
 &= (\omega_i + \omega_k) (2\omega_i + \omega_k + \omega_j) \\
 &= 2\omega_i^2 + 3\omega_i \omega_k + \omega_k^2 + \omega_i \omega_j \\
 &= -\omega_i \omega_4 - \omega_k \omega_4 - \omega_j \omega_k + \omega_i^2 + \omega_i \omega_k \\
 &= -\omega_i \omega_4 - \omega_k \omega_4 - \omega_j \omega_k - \omega_i \omega_4 - \omega_i \omega_j \geq 0 \\
 & "0" \Leftrightarrow \omega_i \omega_4 = \omega_k \omega_4 = \omega_i \omega_j = \omega_k \omega_j = 0 \\
 & \quad \downarrow \\
 & \quad (\omega_i \omega_4 > \omega_j \omega_k) .
 \end{aligned}$$

qed.

2.25. Interpretation

- (1) Ein flächendiagonaler Vektor $\omega_i + \omega_j$ definiert genau dann eine Fläche von $W(0)$, wenn entweder die Kante (ω_i, ω_j) im SELLING-Vierseit oder die Gegenkante eine Null trägt.

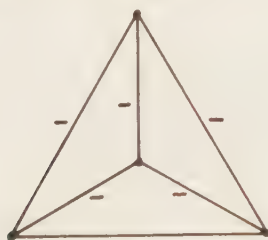


(2) Das SELLING-Vierseit beschreibt die möglichen Fälle, in denen Flächen verschwinden können. Dabei ist zu berücksichtigen, daß an einer Ecke niemals drei Kanten mit Nullen zusammen-treffen können, da $\mathcal{L}v_i^2 > 0$ ist und daß insgesamt höchstens drei Nullen auftreten dürfen, da $(\mathcal{L}v_i + \mathcal{L}v_j)^2 = -\mathcal{L}v_i \mathcal{L}v_k - \mathcal{L}v_j \mathcal{L}v_k - \mathcal{L}v_i \mathcal{L}v_l - \mathcal{L}v_j \mathcal{L}v_l > 0$ ist.

(3) Aus den vorangegangenen Beweisen folgt, daß wenn ein Vektor $\mathcal{L}v_c$ aus S_F keine Fläche definiert, $1/2 \mathcal{L}v_c$ auf einer Kante oder Ecke von $W(0)$ liegt, da keine der Ungleichungen strikt negativ wird.

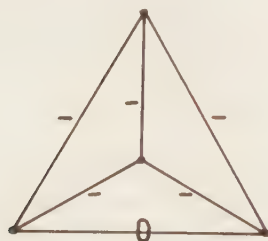
Man erhält daher die folgenden SELLING-Vierseite:

Keine Nullen 14 Flächen

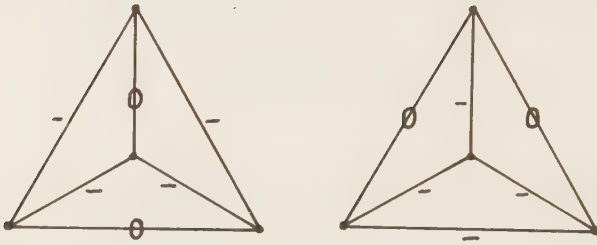


eine Null

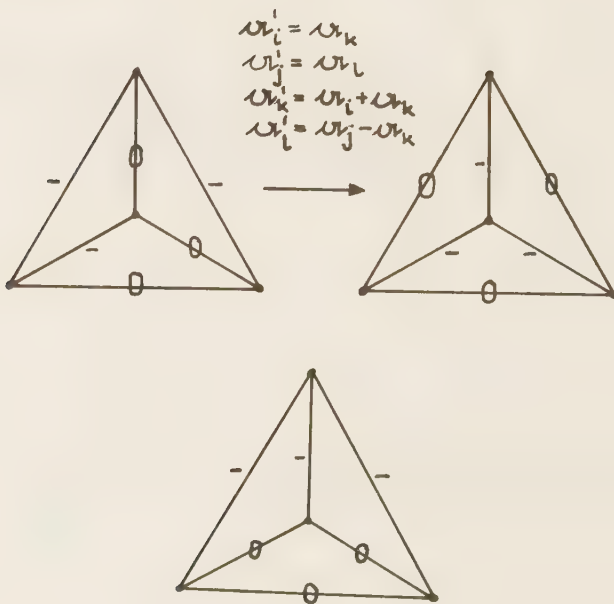
12 Flächen



zwei Nullen



drei Nullen



2.26. Satz

Sind $M(\mathcal{U}_i + \mathcal{U}_j, 0)$ und $M(\mathcal{U}_i + \mathcal{U}_k, 0)$ Flächen von $W(0)$, so haben sie keine gemeinsame Kante.

Beweis

Da $\{\mathcal{U}_i, \mathcal{U}_j + \mathcal{U}_k, \mathcal{U}_i + \mathcal{U}_k\}$ eine Gitterbasis ist, wird durch $\mathcal{U}_i + \mathcal{U}_j$ und $\mathcal{U}_i + \mathcal{U}_k$ eine vollständige Netzebene des Gitters bestimmt. In dieser Ebene sind $\mathcal{U}_i + \mathcal{U}_j$ und $\mathcal{U}_i + \mathcal{U}_k$ die einzigen Elemente von S_F . Wenn $\mathcal{U}_i + \mathcal{U}_j$ und $\mathcal{U}_i + \mathcal{U}_k$ eine gemeinsame Kante haben sollen, muß die an der Fläche $M(\mathcal{U}_i + \mathcal{U}_j, 0)$ zentrosymmetrische Kante durch $M(-\mathcal{U}_i + \mathcal{U}_k, 0)$ bestimmt werden - das ist aber nur möglich, wenn $(\mathcal{U}_i + \mathcal{U}_j)(\mathcal{U}_i + \mathcal{U}_k) = 0$ ist.

Diese Kante durchstößt die Netzebene im Punkt $\mathcal{U}_i + 1/2(\mathcal{U}_j + \mathcal{U}_k)$. Dieser Punkt liegt nicht im Halbraum $H(\mathcal{U}_i, 0)$, denn $(\mathcal{U}_i + 1/2(\mathcal{U}_j + \mathcal{U}_k) - 1/2\mathcal{U}_i) \cdot \mathcal{U}_i = -1/2\mathcal{U}_j \cdot \mathcal{U}_i \geq 0$. Da in $\mathcal{U}_i + 1/2(\mathcal{U}_j + \mathcal{U}_k)$ ein Symmetriezentrum liegt, können $M(\mathcal{U}_i + \mathcal{U}_j, 0)$ und $M(\mathcal{U}_i + \mathcal{U}_k, 0)$ keine gemeinsame Kante besitzen, qed.

2.27. Kantenzonen

Je zwei Vektoren $\mathcal{U}_0, \mathcal{U}_1 \in S_F$ erzeugen eine Netzebene des Gitters. Haben $M(\mathcal{U}_0, 0)$ und $M(\mathcal{U}_1, 0)$ eine gemeinsame Kante an $W(0)$, so steht diese Kante senkrecht auf der Netzebene, ist also parallel zu $\mathcal{U}_0 \times \mathcal{U}_1$. Da in den Flächenmitten von $M(\mathcal{U}_0, 0)$ und $M(\mathcal{U}_1, 0)$ Symmetriezentren sind, treten zwei weitere Kanten parallel zu $\mathcal{U}_0 \times \mathcal{U}_1$ auf.

In einer Netzebene, die von $\mathcal{U}_i + \mathcal{U}_j$ und $\mathcal{U}_i + \mathcal{U}_k$ erzeugt wird, liegen nur diese Vektoren von S_F und ihre Gegenvektoren. Nach Satz 2.26. haben sie keine gemeinsamen Kanten.

In allen anderen Netzebenen liegen je zwei der vier Vektoren u_1, u_2, u_3, u_4 , die Vektoren von S_F in diesen Ebenen können also mit $N(u_i, u_j)$ bezeichnet werden. Es gibt genau $\binom{4}{2} = 6$ solcher Teilmengen von S_F . Die Elemente von $N(u_i, u_j)$ können zyklisch so aufgeschrieben werden, daß jeder Vektor Summe seiner beiden Nachbarvektoren ist:

$$N(u_i, u_j) = \{u_i, -u_j, -u_i - u_j, -u_i, u_j, u_i + u_j\}$$

Sind in $N(u_i, u_j)$ zwei Vektoren e_0, e_1 mit $e_0 e_1 = 0$, so kann $e_0 + e_1$ keine Fläche von $W(0)$ definieren und $1/2(e_0 + e_1)$ gehört als Kantenmitte oder Ecke sowohl zu $M(e_0, 0)$ als auch zu $M(e_1, 0)$.

Streicht man in $N(u_i, u_j)$ die Vektoren, die keine Flächen definieren, so erhält man Teilmengen $Z(u_i, u_j)$, wobei $Z(u_i, u_j)$ eine Kantenzone heißen soll. Haben nämlich zwei zu $Z(u_i, u_j)$ gehörige Flächen eine gemeinsame Kante, so auch alle in zyklischer Reihenfolge benachbarten Vektoren. Hat kein Flächenpaar einer Kantenzone eine gemeinsame Kante, so sagt man die Kantenzone verschwindet. Kennt man alle an $W(0)$ auftretenden Flächen und die Kantenzone, so ist $W(0)$ topologisch vollständig bestimmt, da dann ein $M(e_0, 0)$ ein $(2n)$ -Eck ist, wenn es zu n Kantenzone gehört und außerdem zu sehen ist, welche der $(2n)$ -Ecke benachbart sind.

2.28. Satz

Die Kantenzone $Z(u_i, u_j)$ von $W(0)$ verschwindet genau dann, wenn $u_k u_l = 0$ ist.

Beweis:

Die Vektoren $1/2 e : e \in N(u_i, u_j)$ sind jedenfalls Randpunkte von $W(0)$. Ist $u_k u_l = 0$, so ist $M(u_k + u_l, 0) = M(-u_i - u_j, 0)$

keine Fläche von $W(0)$, also liegt $1/2(\alpha_i + \alpha_j)$ auf einer Kante oder Ecke von $W(0)$. Ist $\alpha_i \alpha_j < 0$, so bedeutet dies, daß $M(\alpha_i, 0)$ und $M(\alpha_j, 0)$ keinen gemeinsamen Punkt besitzen, also ist $1/2(\alpha_i + \alpha_j)$ Kantenmitte der Kante zwischen $M(\alpha_k, 0)$ und $M(\alpha_l, 0)$.

Ist $\alpha_i \alpha_j = 0$, so berührt $1/2(\alpha_i + \alpha_j)$ die Flächen $M(\alpha_i, 0)$, $M(\alpha_j, 0)$, $M(-\alpha_k, 0)$ und $M(-\alpha_l, 0)$, also ist $1/2(\alpha_i + \alpha_j)$ Eckpunkt von $W(0)$. In beiden Fällen besitzen $M(\alpha_i, 0)$ und $M(\alpha_j, 0)$ keine gemeinsame Kante und die Kantenzone $Z(\alpha_i, \alpha_j)$ verschwindet.

Ist umgekehrt die Kantenzone $Z(\alpha_i, \alpha_j)$ nicht vorhanden, so bedeutet dies, daß die Fläche $M(\alpha_i + \alpha_j, 0)$ nicht Wirkungsbereichsfläche ist, d.h. es ist entweder $\alpha_i \alpha_j = 0$ oder $\alpha_k \alpha_l = 0$. Ist $\alpha_i \alpha_j = 0$, so liegt $1/2(\alpha_i + \alpha_j)$ auf der Kante der Flächen $M(\alpha_i, 0)$ und $M(\alpha_j, 0)$. Da $Z(\alpha_i, \alpha_j)$ verschwindet, muß $1/2(\alpha_i + \alpha_j)$ Ecke von $W(0)$ sein, d.h. auch $\alpha_k \alpha_l = 0$. In beiden Fällen ist also $\alpha_k \alpha_l = 0$.

qed.

2.29. Folgerung

Man kann die Wirkungsbereichstypen sofort aus dem SELLING-Vierseit ableiten.

Ist ein Skalarprodukt $\alpha_i \alpha_j$ im SELLING-Vierseit null, so streicht man die Zone $Z(\alpha_k, \alpha_l)$ und die Flächen $M(\alpha_i + \alpha_j, 0)$ und $M(-\alpha_k - \alpha_l, 0)$.

Die verbleibenden Zonen enthalten alle vorhandenen Flächen und geben die Kanten der Flächen miteinander an.

Man erhält daher die folgenden Typen:

1. alle Skalarprodukte $\alpha_i \alpha_j < 0$; sämtliche Flächen und Kanten treten auf. Die Flächen $M(\alpha_i + \alpha_j, 0)$ sind Vierecke und die Flächen $M(\alpha_i, 0)$ Sechsecke.

2. $\alpha_j \alpha_k = 0$

Die Zone $Z(\alpha_i, \alpha_j)$ und die Fläche $M(\alpha_j + \alpha_k, 0)$ verschwinden. Es bleiben

$$Z(\alpha_i, \alpha_j)$$

$$= \{\alpha_i, -\alpha_j, -\alpha_i - \alpha_j, -\alpha_i, \alpha_j, \alpha_i + \alpha_j\}$$

$$Z(\alpha_i, \alpha_k)$$

$$= \{\alpha_i, -\alpha_k, -\alpha_i - \alpha_k, -\alpha_i, \alpha_k, \alpha_i + \alpha_k\}$$

$$Z(\alpha_j, \alpha_k)$$

$$= \{\alpha_j, -\alpha_k, -\alpha_j, \alpha_k\}$$

$$Z(\alpha_j, \alpha_i)$$

$$= \{\alpha_j, -\alpha_i, \alpha_j + \alpha_i, -\alpha_j, \alpha_i, -\alpha_i - \alpha_j\}$$

$$Z(\alpha_k, \alpha_i)$$

$$= \{\alpha_k, -\alpha_i, \alpha_k + \alpha_i, -\alpha_k, \alpha_i, -\alpha_i - \alpha_k\}$$

Die Flächen

$M(\alpha_j, 0)$ und $M(\alpha_k, 0)$ sind also Sechseckflächen

$M(\alpha_i, 0)$, $M(\alpha_j, 0)$, $M(\alpha_i + \alpha_j, 0)$ und $M(\alpha_i + \alpha_k, 0)$ bestimmen Viereckflächen.

3. $\alpha_i \alpha_j = \alpha_i \alpha_k = 0$

Die Zonen $Z(\alpha_k, \alpha_j)$ und $Z(\alpha_j, \alpha_i)$ verschwinden, außerdem die Flächen $M(\alpha_i + \alpha_j, 0)$, $M(\alpha_i + \alpha_k, 0)$ und $M(\alpha_i, 0)$. Es verbleiben:

$$Z(\alpha_i, \alpha_j) = \{\alpha_i, -\alpha_j, -\alpha_i, \alpha_j\}$$

$$Z(\alpha_i, \alpha_k) = \{\alpha_i, -\alpha_k, -\alpha_i, \alpha_k\}$$

$$Z(\alpha_j, \alpha_i) = \{\alpha_j, \alpha_j + \alpha_k, -\alpha_i, -\alpha_j - \alpha_k\}$$

$$Z(\alpha_j, \alpha_k) = \{\alpha_j, -\alpha_k, -\alpha_j - \alpha_k, -\alpha_j, \alpha_k, \alpha_j + \alpha_k\}$$

Daher ist $M(\alpha_i, 0)$ eine Sechseckfläche und $M(\alpha_j, 0)$, $M(\alpha_k, 0)$ und $M(\alpha_j + \alpha_k, 0)$ Vierecksflächen. (Unreg. hexag. Säule).

4. $\alpha_i \alpha_j = \alpha_j \alpha_k = 0$

Es entfallen die Zonen $Z(\alpha_j, \alpha_k)$ und $Z(\alpha_i, \alpha_j)$ sowie die Fläche $M(\alpha_j + \alpha_k, 0)$, also bleiben

$$Z(\alpha_i, \alpha_j) = \{\alpha_i, -\alpha_j, -\alpha_i - \alpha_j, -\alpha_i, \alpha_j, \alpha_i + \alpha_j\}$$

$$Z(\alpha_i, \alpha_k) = \{\alpha_i, -\alpha_k, -\alpha_i - \alpha_k, -\alpha_i, \alpha_k, \alpha_i + \alpha_k\}$$

$$Z(\alpha_j, \alpha_k) = \{\alpha_j, -\alpha_k, \alpha_j + \alpha_k, -\alpha_j, \alpha_k, -\alpha_j - \alpha_k\}$$

$$Z(\alpha_k, \alpha_j) = \{\alpha_k, -\alpha_j, \alpha_k + \alpha_j, -\alpha_k, \alpha_j, -\alpha_k - \alpha_j\}$$

Alle Flächen sind Vierecke. (Deform. Rhombendodekaeder)

5. $\alpha_j \alpha_k = \alpha_k \alpha_i = \alpha_j \alpha_k = 0$

Es entfallen die Zonen

$Z(\alpha_i, \alpha_k)$, $Z(\alpha_i, \alpha_j)$ und $Z(\alpha_j, \alpha_k)$ und die Flächen

$M(\alpha_i + \alpha_k, 0)$, $M(\alpha_i + \alpha_j, 0)$, $M(\alpha_j + \alpha_k, 0)$ sowie

$M(\alpha_i, 0)$. Also bleibt $Z(\alpha_j, \alpha_k) = \{\alpha_j, -\alpha_k, -\alpha_j, \alpha_k\}$

$$Z(\alpha_j, \alpha_i) = \{\alpha_j, -\alpha_i, -\alpha_j, \alpha_i\}$$

$$Z(\alpha_k, \alpha_i) = \{\alpha_k, -\alpha_i, -\alpha_k, \alpha_i\}$$

$\Rightarrow$ Quader.

6. Ebenfalls Quader

2.30. Ergebnis

Es gibt fünf Typen von Wirkungsbereichen von Gittern, die VORONOI-Typen V_I , V_{II} , V_{III} , V_{IV} , V_V .

V_I ist ein deformiertes Kuboktaeder, V_{II} eine rechteckige Säule mit oben und unten aufgesetzter Pyramide, V_{III} ein deformiertes

Rhombendodekaeder. V_{IV} eine unregelmäßig hexagonale Säule und V_V ein Quader. Der Typ von $U(0)$ kann an der Verteilung der Nullen auf den Kanten des SELLINGSchen Vierseits und damit aus dem Metriktensor der DELAUNAY-reduzierten Zelle abgelesen werden.

3. Symmetriegruppen von Wirkungsbereichen

Jeder Wirkungsbereich eines Gitters hat wegen des Symmetriezentrums in seinem Mittelpunkt mit jeder Drehsymmetrie auch die Drehung mit anschließender Inversion als Symmetrieoperation. Man kennt also die Symmetrie eines Wirkungsbereichs vollständig, wenn man seine Drehsymmetrie kennt. Die Drehungen bilden für sich wegen des Produktsatzes für Determinanten eine Gruppe, die Drehgruppe des Polyeders.

3.1. Bezeichnungen

Die Symmetriegruppe eines Wirkungsbereichs ist eine Punktgruppe, da ein endliches Polyeder keine Translationssymmetrie besitzen kann. Die Symmetrieoperationen sind also Drehungen und Drehinversionen, je nachdem ob die Determinante $= +1$ oder -1 ist. Ist n die Ordnung der Drehung D , d.h. ist n die kleinste Zahl mit $D^n = E$ ($=$ Identität), so bezeichnet man die Drehung mit der Zahl n , an die nach Festlegung eines Koordinatensystems als Index eine verkürzte Parameterdarstellung der Drehachse angefügt wird, etwa 2_x ist eine Drehung um 180° mit Drehachse in $\{(x00)/x \in \mathbb{R}\}$ Richtung, 2_{xy} ist Drehung um 180° mit Drehachse in $\{(xx0)/x \in \mathbb{R}\}$ und 3_{xxx} ist eine Drehung um 120° mit Drehachse in $\{(x\bar{x}x)/x \in \mathbb{R}\}$. Ist D_i eine Drehinversion, so ist $D_i = D I$, wobei I die Inversion am Nullpunkt und D eine Drehung ist. D_i wird deshalb durch $\bar{n}$ bezeichnet, wobei n die Ordnung von D ist. Die Operation $\bar{2}$ erhält einen eigenen Buchstaben m . Als Richtungen werden den Drehinversionen die Richtungen der zugehörigen Drehachse angefügt. Da $1 =$ Identität keine ausgezeichnete Achse besitzt, ist dies auch für $\bar{1}$ nicht der Fall; diese beiden Operationen werden also ohne Indizes verwendet.

3.2. Symmetrioperationen an Wirkungsbereiche

Im folgenden soll nur noch die Drehsymmetrie von $W(0)$ untersucht werden. An einem Polyeder kann eine Drehachse nur senkrecht auf einer Fläche oder Kante stehen oder durch eine Ecke verlaufen. Da an Wirkungsbereichen nur Vier- und Sechseckflächen auftreten, können auf Flächen nur 6-, 4-, 3-, 2-zählige Drehachsen auftreten. Auf den Kanten können nur 2-zählige Achsen vorkommen. In einer Ecke stoßen entweder drei oder vier Flächen zusammen. Daher gibt es durch Ecken nur 2-, 3- oder vierzählige Achsen. Insgesamt können an Wirkungsbereichen nur Drehachsen 1, 2, 3, 4 und 6 auftreten. Die möglichen Symmetriegruppen sollen nun anhand der speziellen Betrachtung der Wirkungsbereiche abgeleitet werden.

3.3. Satz

Ein Wirkungsbereich $W(0)$ besitzt eine Symmetrie S genau dann, wenn für $(i,j) \in \mathbb{Z}_4^2 \setminus \Delta$ ($\Delta = \{(i,i), i \in \mathbb{Z}_4\}$) $S(\mathcal{U}_i) S(\mathcal{U}_j) = \mathcal{U}_i \mathcal{U}_j$ ist.

Beweis:

Besitzt $W(0)$ die Symmetrie S , so wird die DELAUNAY-reduzierte Basis auf eine andere DELAUNAY-reduzierte Basis abgebildet, und da die Bewegung starr ist, bleibt das Skalarprodukt invariant. Ist umgekehrt die Bedingung erfüllt, so ist auch $\{S(\mathcal{U}_1), S(\mathcal{U}_2), S(\mathcal{U}_3), S(\mathcal{U}_4)\}$ ein DELAUNAY-Quadrupel des Gitters und das Gitter somit invariant unter S und damit auch $W(0)$.

qed.

3.4. Symmetriebedingungen

Um die möglichen Drehsymmetrien der Wirkungsbereiche abzuleiten, muß man nach Satz 3.3. zunächst die Symmetrioperationen auf den Vektoren $\mathcal{U}_1, \mathcal{U}_2, \mathcal{U}_3, \mathcal{U}_4$ auffinden. Das kann man besonders leicht durchführen, wenn man die stereographischen Projektionen

der Polyeder längs der jeweiligen Drehachse zeichnet. Man erhält auf diese Weise die sogenannten SCHLEGEL-Diagramme der Polyeder. In jede Fläche trägt man dann den Gittervektor ein, dessen mittelsenkrechte Ebene die Polyederfläche bildet. Bei diesen Diagrammen kommt es nicht auf die genaue Projektion an, sondern nur die Topologie des Kantennetzes muß korrekt wiedergegeben sein. Besitzt ein Wirkungsbereich eine Drehachse, so bleibt diese Symmetrie auch bei der Projektion längs dieser Achse erhalten. Daher kann man zu jedem $\mathcal{L}_i$ das zugehörige $S(\mathcal{L}_i)$ aus dem SCHLEGEL-Diagramm direkt ablesen. Die verschiedenen SCHLEGEL-Diagramme der VORONOI-Typen sind in der folgenden Tabelle zusammengestellt.

Kennt man die $S(\mathcal{L}_i)$, so kann man gemäß Satz 3.3. die Symmetriebedingungen als Gleichheiten zwischen Skalarprodukten ableiten. Diese Bedingungen sind für jedes S ausgerechnet und in der letzten Spalte der zweiten Tabelle durch Markierung der Kanten des SELLING-Vierseits angegeben.

Man sieht sofort, daß das Vorhandensein einer Drehachse oftmals Symmetriebedingungen erzeugt, die auch die Existenz anderer Drehachsen erzwingen, so ist bei V_I etwa, wenn $4\mathcal{L}_i + \mathcal{L}_j$ ()

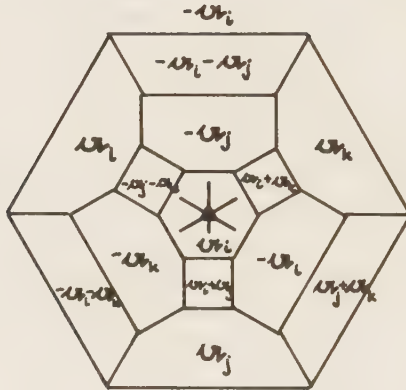
Symmetrie ist auch $2\mathcal{L}_i - \mathcal{L}_j$



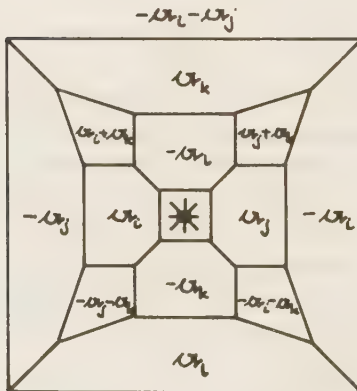
Drehachse des Polyeders.

Das folgende Programm besteht darin, zu jedem VORONOI-Typ diejenigen Symmetriegruppen zu finden, die durch spezielle Wahl der Gitterparameter von dem Polyeder angenommen werden können. Nach Satz 3.3. bedeutet dies, daß zu untersuchen ist, welche wesentlich verschiedenen Typen von SELLING-Vierseiten möglich sind. Dabei sind zwei Polyeder der gleichen symmetrischen Sorte zuzurechnen, wenn sie zum gleichen VORONOI-Typ gehören, dieselbe Symmetriegruppe besitzen und die Lage der Drehachsen relativ zum Polyeder dieselbe ist.

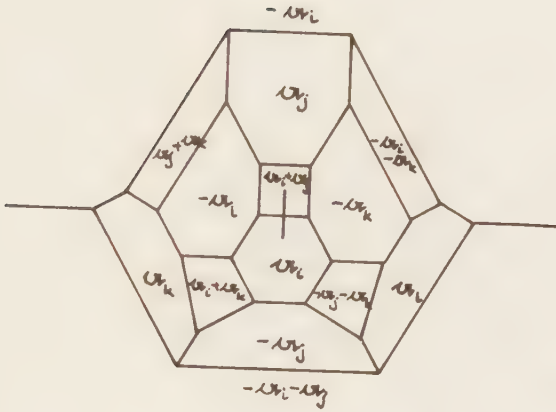
3.5. Tabelle der SCHLEGEL-Diagramme



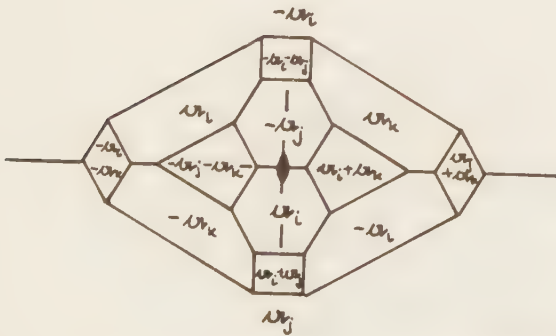
$V_I(6)$: SCHLEGEL-Diagramm für eine Sechseckfläche



$V_I(4)$: SCHLEGEL-Diagramm für eine Viereckfläche

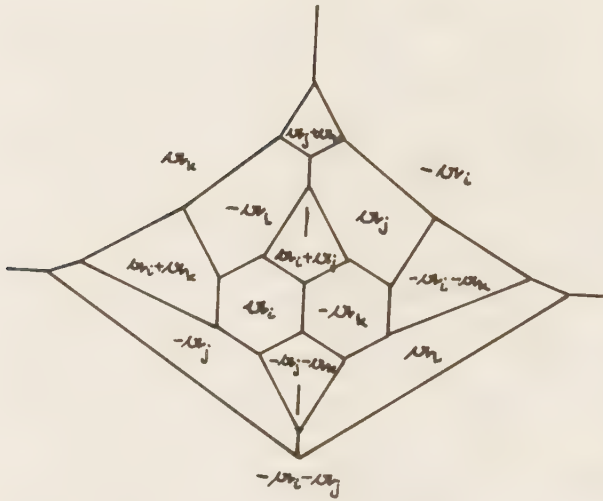


$V_I(6,4)$: SCHLEGEL-Diagramm für eine Sechseck- Viereck-Kante

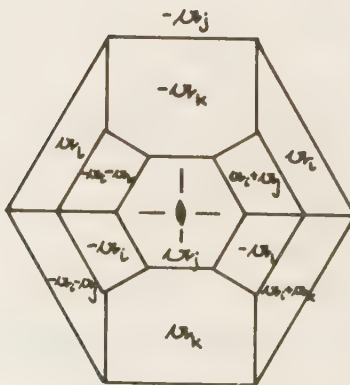


$V_I(6,6)$: SCHLEGEL-Diagramm für eine Sechseck-Sechseck-Kante

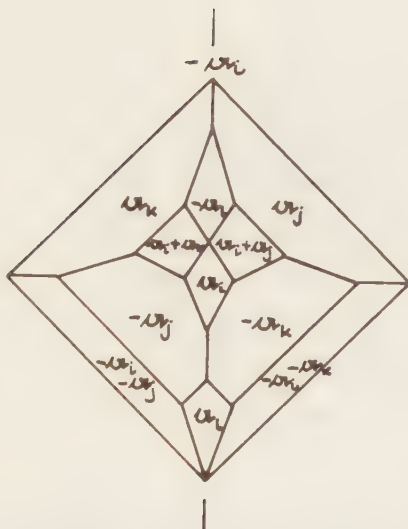
- 40 -



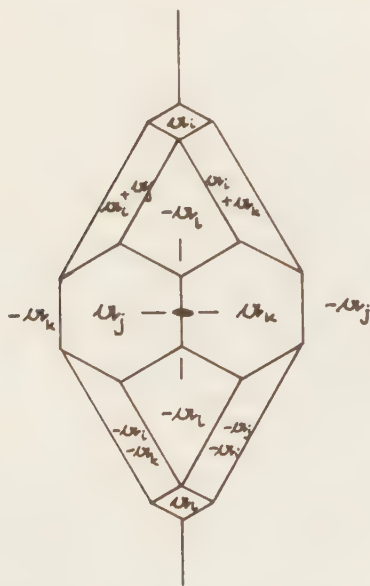
$V_I(6,6,4)$: SCHLEGEL-Diagramm für eine Sechseck-Sechseck-Viereck-Ecke



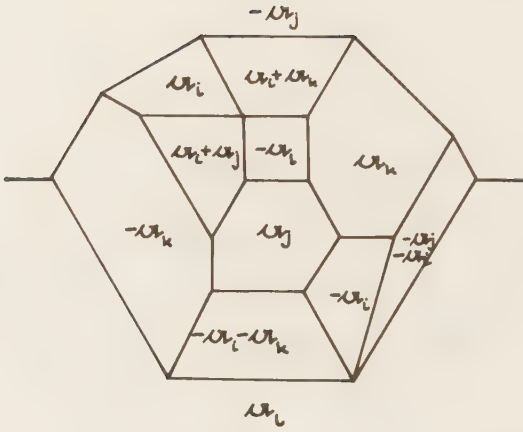
$V_{II}(6)$: SCHLEGEL-Diagramm für eine Sechseckfläche



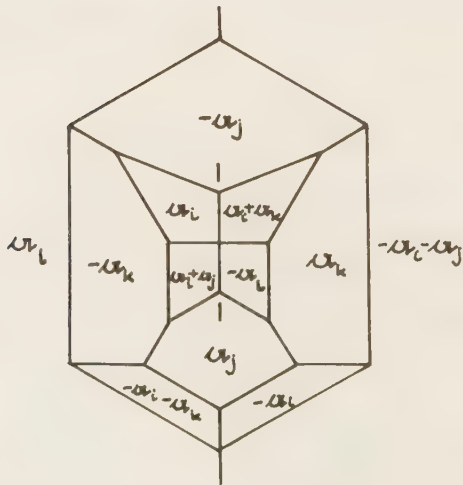
$V_{II}(4)$: SCHLEGEL-Diagramm für eine Vierecksfläche



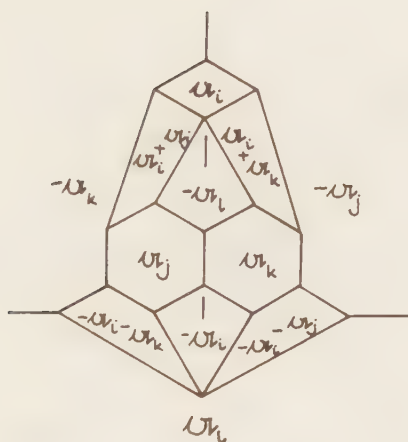
$V_{II}(6,6)$: SCHLEGEL-Diagramm für eine Sechseck-Sechseck-Kante



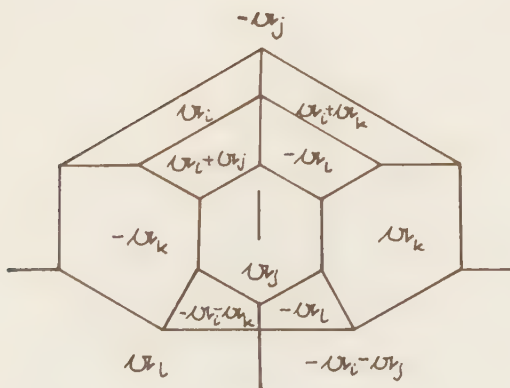
$V_{II}(6,4)$: SCHLEGEL-Diagramm für eine Sechseck-Viereck-Kante



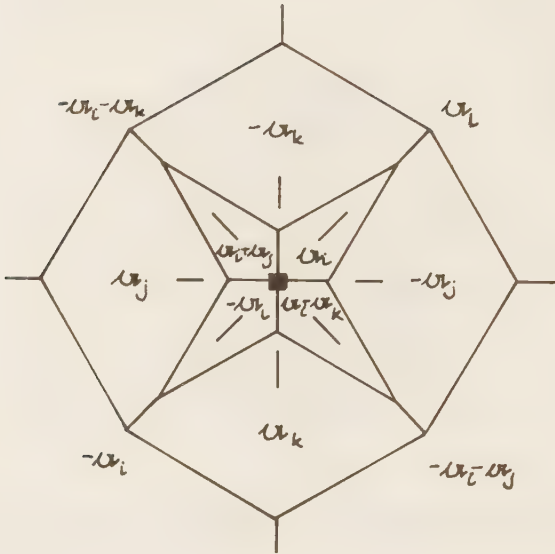
$V_{II}(4,4)$: SCHLEGEL-Diagramm für eine Viereck-Viereck-Kante



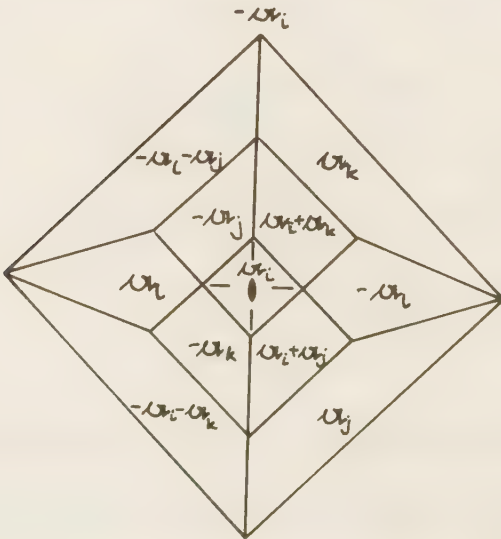
$V_{II}(6,6,4)$: SCHLEGEL-Diagramm für eine Sechseck-Sechseck-Viereck-Ecke



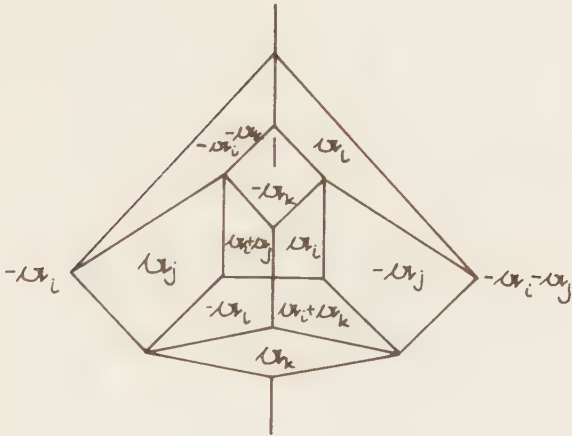
$V_{II}(6,4,4)$: SCHLEGEL-Diagramm für eine Sechseck-Viereck-Viereck-Ecke



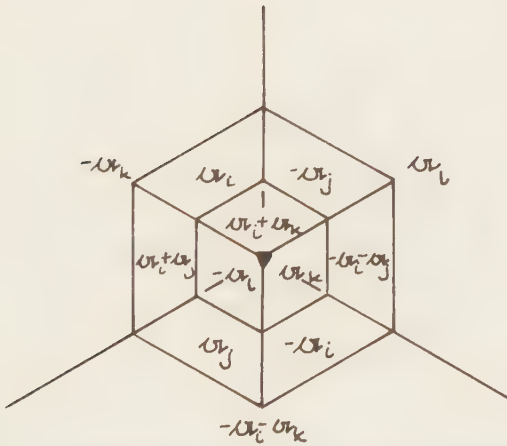
$V_{II}(4,4,4,4)$: SCHLEGEL-Diagramm für eine Viereck-Viereck-Viereck-Viereck-Ecke



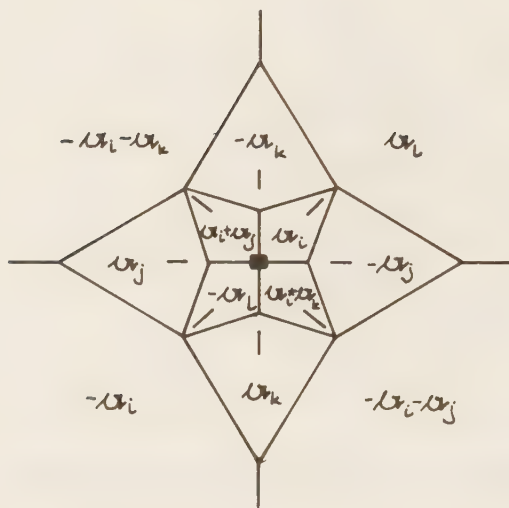
$V_{III}(4)$: SCHLEGEL-Diagramm für eine Vierecksfläche



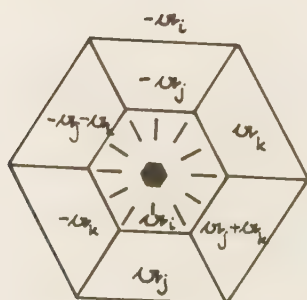
$V_{III}(4,4)$: SCHLEGEL-Diagramm für eine Viereck-Viereck-Kante



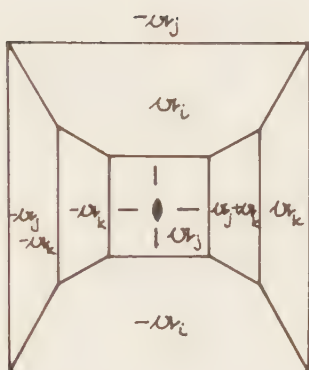
$V_{III}(4,4,4)$: SCHLEGEL-Diagramm für eine Viereck-Viereck-Viereck-Ecke



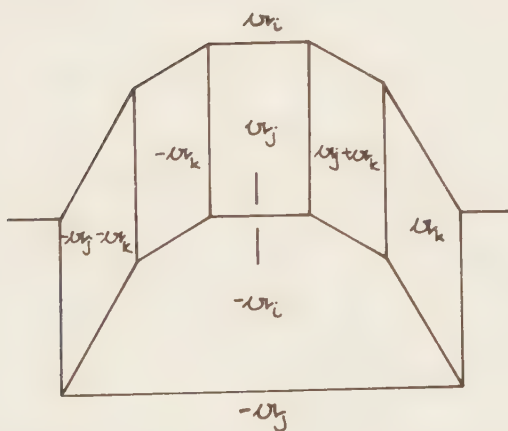
$V_{III}(4,4,4,4)$: SCHLEGEL-Diagramm für eine Viereck-Viereck-Viereck-Viereck-Ecke



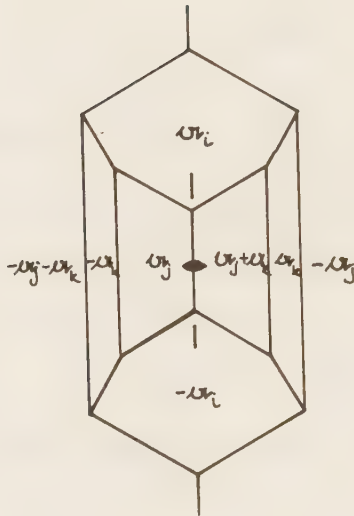
$V_{IV}(6)$: SCHLEGEL-Diagramm für eine Sechseckfläche



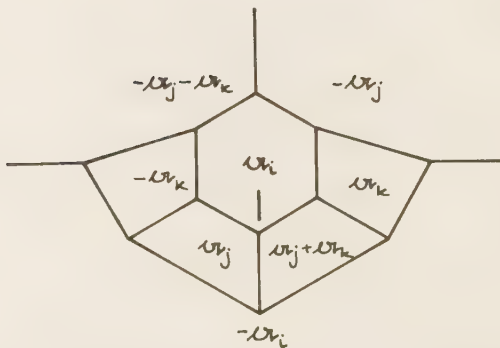
$V_{IV}(4)$: SCHLEGEL-Diagramm für eine Vierecksfläche



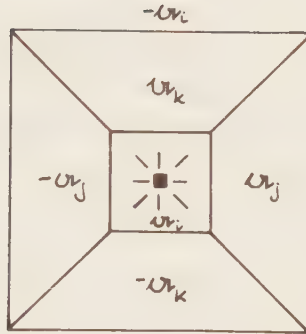
$V_{IV}(6,4)$: SCHLEGEL-Diagramm für eine Sechseck-Viereck-Kante



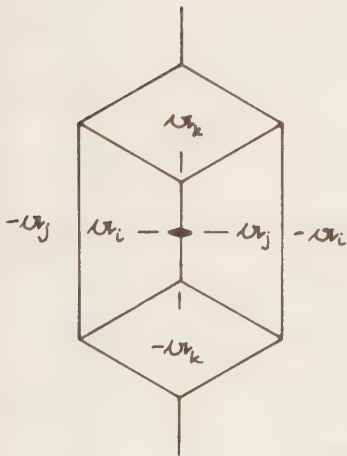
$V_{IV}(4,4)$: SCHLEGEL-Diagramm für eine Viereck-Viereck-Kante



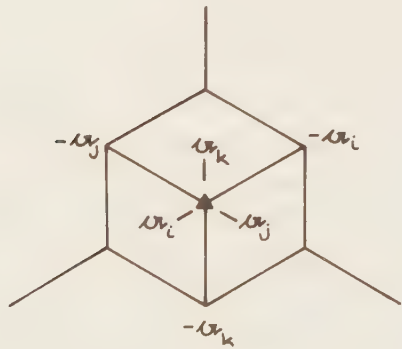
$V_{IV}(6,4,4)$: SCHLEGEL-Diagramm für eine Sechseck-Viereck-Viereck-Ecke



$V_V(4)$: SCHLEGEL-Diagramm für eine Vierecksfläche



$V_V(4,4)$: SCHLEGEL-Diagramm für eine Viereck-Viereck-Kante



$V_V(4,4,4)$: SCHLEGEL-Diagramm für eine Viereck-Viereck-Viereck-Ecke

3.6. Tabelle der möglichen Symmetrieeoperationen und ihrer
SELLING-Vierseite

VORONOI- Typ	Symmetrie- Operation	$S(\sigma_i)$	$S(\sigma_j)$	$S(\sigma_k)$	$S(\sigma_l)$	SELLING - Vierseit
V_I	$4 \sigma_i + \sigma_j$	$-\sigma_k$	$-\sigma_l$	$-\sigma_j$	$-\sigma_i$	
	$4 \sigma_i + \sigma_k$	$-\sigma_l$	$-\sigma_i$	$-\sigma_j$	$-\sigma_k$	
	$4 \sigma_j + \sigma_k$	$-\sigma_k$	$-\sigma_i$	$-\sigma_l$	$-\sigma_j$	
	$3 \sigma_i$	σ_i	σ_k	σ_l	σ_j	
	$3 \sigma_j$	σ_l	σ_j	σ_i	σ_k	
	$3 \sigma_k$	σ_j	σ_l	σ_k	σ_i	
	$3 \sigma_l$	σ_k	σ_i	σ_j	σ_l	
	$2 \sigma_i + \sigma_j$	σ_j	σ_l	σ_l	σ_k	
	$2 \sigma_i + \sigma_k$	σ_k	σ_l	σ_i	σ_j	
	$2 \sigma_j + \sigma_k$	σ_l	σ_k	σ_j	σ_i	
	$2 \sigma_i - \sigma_j$	$-\sigma_j$	$-\sigma_l$	$-\sigma_k$	$-\sigma_i$	
	$2 \sigma_i - \sigma_k$	$-\sigma_k$	$-\sigma_j$	$-\sigma_l$	$-\sigma_i$	
	$2 \sigma_i - \sigma_l$	$-\sigma_l$	$-\sigma_j$	$-\sigma_k$	$-\sigma_i$	
	$2 \sigma_j - \sigma_k$	$-\sigma_i$	$-\sigma_k$	$-\sigma_j$	$-\sigma_l$	
	$2 \sigma_j - \sigma_l$	$-\sigma_i$	$-\sigma_l$	$-\sigma_k$	$-\sigma_j$	
	$2 \sigma_k - \sigma_l$	$-\sigma_i$	$-\sigma_j$	$-\sigma_l$	$-\sigma_k$	

VORONOI- Typ	Symmetrie- Operation	$S(\omega_i)$	$S(\omega_j)$	$S(\omega_k)$	$S(\omega_l)$	SELLING- Vierseit
V _{II}	$4 \omega_i - \omega_l$	$\omega_i + \omega_j$	ω_k	$-\omega_j$	$-\omega_i - \omega_k$	
	$2 \omega_j$	$-\omega_i - \omega_j$	ω_j	$-\omega_k$	$\omega_i + \omega_k$	
	$2 \omega_k$	$-\omega_i - \omega_k$	$-\omega_j$	ω_k	$\omega_i + \omega_j$	
	$2 \omega_i - \omega_l$	$-\omega_i$	$-\omega_j$	$-\omega_k$	$-\omega_i$	
	$2 \omega_j + \omega_k$	ω_i	ω_k	ω_j	ω_i	
	$2 \omega_j - \omega_k$	$-\omega_i$	$-\omega_k$	$-\omega_j$	$-\omega_i$	
V _{III}	$4 \omega_j + \omega_k$	$-\omega_k$	$-\omega_i$	$-\omega_i$	$-\omega_j$	
	$4 \omega_j - \omega_k$	$-\omega_i$	$-\omega_i - \omega_k$	$-\omega_i - \omega_j$	ω_i	
	$4 \omega_i - \omega_l$	$\omega_i + \omega_j$	ω_k	$-\omega_j$	$-\omega_i - \omega_k$	
	$3 (\omega_i + \omega_k) + \omega_l - \omega_j$	ω_j	$-\omega_i - \omega_j$	$\omega_i + \omega_k$	$-\omega_k$	
	$3 (\omega_i + \omega_j) + \omega_l - \omega_k$	ω_k	$\omega_i + \omega_j$	$\omega_i - \omega_k$	$-\omega_j$	
	$3 (\omega_i + \omega_j) + \omega_l - \omega_k$	$\omega_i + \omega_j$	ω_i	$-\omega_i$	$\omega_i + \omega_k$	
	$3 (\omega_i + \omega_k) + \omega_l - \omega_j$	$-\omega_j$	$-\omega_i - \omega_k$	$\omega_i + \omega_j$	ω_k	
	$2 \omega_i$	ω_i	$-\omega_i - \omega_j$	$-\omega_i - \omega_k$	$-\omega_i$	
	$2 \omega_j$	$-\omega_i - \omega_j$	ω_j	$-\omega_k$	$\omega_i + \omega_k$	
	$2 \omega_k$	$-\omega_i - \omega_k$	$-\omega_j$	ω_k	$\omega_i + \omega_j$	

VORONOI- Typ	Symmetrie- Operation	$S(\alpha_i)$	$S(\alpha_j)$	$S(\alpha_k)$	$S(\alpha_l)$	SELLING - Vierseit
V _{III}	$2 \alpha_l$	$-\alpha_i$	$\alpha_i + \alpha_k$	$\alpha_i + \alpha_j$	α_l	
	$2 \alpha_j + \alpha_k$	α_l	α_k	α_j	α_i	
	$2 \alpha_i + \alpha_k$	α_k	α_l	α_l	α_j	
	$2 \alpha_i + \alpha_j$	α_j	α_i	α_l	α_k	
	$2 \alpha_j - \alpha_k$	$-\alpha_i$	$-\alpha_k$	$-\alpha_j$	$-\alpha_l$	
	$2 \alpha_i - \alpha_l$	$-\alpha_l$	$-\alpha_j$	$-\alpha_k$	$-\alpha_i$	
V _{IV}	$6 \alpha_i$	α_l	$\alpha_j + \alpha_k$	$-\alpha_j$	$-\alpha_i - \alpha_k$	
	$3 \alpha_i$	α_l	α_k	$-\alpha_j - \alpha_k$	$\alpha_j - \alpha_l$	
	$2 \alpha_l$	α_l	$-\alpha_j$	$-\alpha_k$	$\alpha_j + \alpha_k - \alpha_l$	
	$2 \alpha_j$	$-\alpha_l$	α_j	$-\alpha_j - \alpha_k$	$\alpha_i + \alpha_k$	
	$2 \alpha_k$	$-\alpha_l$	$-\alpha_j - \alpha_k$	α_k	$\alpha_i + \alpha_j$	
	$2 \alpha_j + \alpha_k$	$-\alpha_l$	α_k	α_j	$-\alpha_j - \alpha_k + \alpha_l$	
	$2 \alpha_k + \alpha_j$	$-\alpha_l$	$-\alpha_j$	$\alpha_j + \alpha_k$	$\alpha_l - \alpha_k$	
	$2 \alpha_j + \alpha_k$	$-\alpha_l$	$\alpha_j + \alpha_k$	$-\alpha_k$	$\alpha_l - \alpha_j$	
	$2 \alpha_j - \alpha_k$	$-\alpha_l$	$-\alpha_k$	$-\alpha_j$	$-\alpha_l$	

VORONOI- Typ	Symmetrie- Operation	$S(\omega_i)$	$S(\omega_j)$	$S(\omega_k)$	$S(\omega_l)$	SELLING- Vierseit
V V	$4 \omega_i$	ω_i	ω_k	$-\omega_j$	$-\omega_i + \omega_j - \omega_k$	
	$4 \omega_j$	$-\omega_k$	ω_j	ω_i	$-\omega_i - \omega_j + \omega_k$	
	$4 \omega_k$	ω_j	$-\omega_i$	ω_k	$\omega_i - \omega_j - \omega_k$	
	$3 \omega_i + \omega_j + \omega_k$	ω_j	ω_k	ω_i	ω_l	
	$3 -\omega_i + \omega_j + \omega_k$	$-\omega_k$	$-\omega_i$	ω_j	$\omega_i - \omega_j + \omega_k$	
	$3 \omega_i - \omega_j + \omega_k$	ω_k	$-\omega_i$	$-\omega_j$	$\omega_i + \omega_j - \omega_k$	
	$3 \omega_i + \omega_j - \omega_k$	$-\omega_k$	ω_i	$-\omega_j$	$-\omega_i + \omega_j + \omega_k$	
	$2 \omega_i$	ω_i	$-\omega_j$	$-\omega_k$	$-\omega_i + \omega_j + \omega_k$	
	$2 \omega_j$	$-\omega_i$	ω_j	$-\omega_k$	$\omega_i - \omega_j + \omega_k$	
	$2 \omega_k$	$-\omega_i$	$-\omega_j$	ω_k	$\omega_i + \omega_j - \omega_k$	
	$2 \omega_i + \omega_j$	ω_j	ω_i	$-\omega_k$	$-\omega_i - \omega_j + \omega_k$	
	$2 \omega_j + \omega_k$	$-\omega_i$	ω_k	ω_j	$\omega_i - \omega_j - \omega_k$	
	$2 \omega_i + \omega_k$	ω_k	$-\omega_j$	ω_i	$-\omega_i + \omega_j - \omega_k$	
	$2 \omega_i - \omega_j$	$-\omega_j$	$-\omega_i$	$-\omega_k$	$-\omega_l$	
	$2 \omega_j - \omega_k$	$-\omega_i$	$-\omega_k$	$-\omega_j$	$-\omega_l$	
	$2 \omega_i - \omega_k$	$-\omega_k$	$-\omega_j$	$-\omega_i$	$-\omega_l$	

Im folgenden werden die SELLING-Vierseite nach den möglichen Gleichheiten ihrer Kanten klassifiziert. Jede Gleichheit vermindert die Zahl der unabhängigen Kanten. Das Problem besteht also darin, nach Festlegung von k Nullen auf den Kanten, die restlichen $(6-k)$ Kanten so mit höchstens $(6-k)$ Symbolen zu kennzeichnen, daß zwei Kanten genau dann das gleiche Symbol erhalten, wenn die zugehörigen Skalarprodukte übereinstimmen. Zwei SELLING-Vierseite sollen dann als gleich angesehen werden, wenn sie als Tetraeder betrachtet durch eine starre Bewegung so zur Deckung gebracht werden können, daß Kanten, die in dem einen SELLING-Vierseit gleiche Symbole tragen auch im anderen SELLING-Vierseit gleich bezeichnet sind.

Um keine Möglichkeiten zu übersehen, ist hier eine Fallunterscheidung vorgenommen worden. Jede Anordnung von Symbolen auf den $(6-k)$ Kanten definiert eine Zerlegung der Zahl $(6-k)$ in Summanden, wenn man als Summanden die Anzahlen der jeweils gleich bezeichneten Kanten verwendet. Die Anzahl $p(n)$ der möglichen Zerlegungen einer Zahl n ist aus der Kombinatorik bekannt (vgl. etwa M.HALL, Combinatorial Theory). Die ersten n Werte für $p(n)$ sind

n	1	2	3	4	5	6
$p(n)$	1	2	3	5	7	11

Die möglichen Fälle der SELLING-Vierseite können daher nach den Zerlegungen der Zahl $(6-k)$ klassifiziert werden. Innerhalb dieser Fälle müssen nur noch die geometrisch verschiedenen Anordnungen der Symbole auf den Kanten untersucht werden. Hinter jedem Fall ist daher die zugehörige Zerlegung der Zahl $(6-k)$ in Summanden angegeben.

V_I

1. Fall (1, 1, 1, 1, 1, 1)

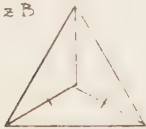
①



keine Gleichheit
Symmetrie $\{1, \bar{1}\}$

2. Fall (2, 1, 1, 1)

z.B.



eine Gleichheit definiert nach der Tabelle
keine Symmetrie.

3. Fall zwei Gleichheiten (2, 2, 1, 1)

②



$$2 \cdot \omega_i = \omega_k$$



2 $\perp$ Fläche
($\omega_i + \omega_k$)



-

③



$$2 \cdot \omega_j = \omega_k$$



2 $\perp$ Kante
($\omega_j = \omega_k$)



-

4. Fall (2,2,2)

(4)



$$2\omega_i + \omega_k$$

$$2\omega_i + \omega_j$$

$$2\omega_j + \omega_k$$



$$2\omega_j - \omega_k$$



$$2\omega_j - \omega_k$$



—

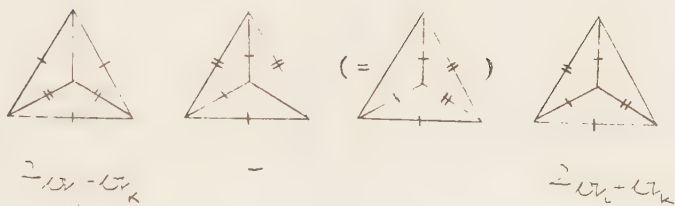
$$\begin{aligned} (\omega_i + \omega_k) (\omega_i + \omega_j) &= \omega_i^2 + \omega_i \omega_k + \omega_i \omega_j + \omega_j \omega_k \\ &= -\omega_i \omega_k + \omega_j \omega_k = 0 \end{aligned}$$

$$2\omega_i + \omega_k \perp 2\omega_i + \omega_j \perp 2\omega_j + \omega_k \perp 2\omega_i + \omega_k$$

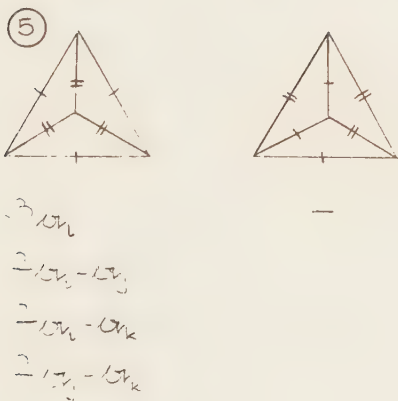
5. Fall (3,1,1,1)

keine Symmetriebedingung

6. Fall (3,2,1)



7. Fall (3,3)



8. Fall (4, 1, 1,)

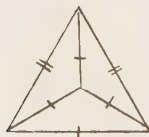


—

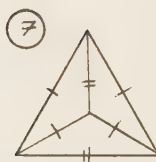


$$\begin{aligned} 2\alpha_j - \alpha_k \\ 2\alpha_i - \alpha_k \\ 2\alpha_j + \alpha_k \end{aligned}$$

9. Fall (4, 2)



$$2\alpha_j - \alpha_k$$



$$\begin{aligned} 4\alpha_j + \alpha_k \\ 2\alpha_i + \alpha_j \\ 2\alpha_i + \alpha_k \\ 2\alpha_j + \alpha_k \\ \alpha_i - \alpha_k \\ 2\alpha_j - \alpha_k \end{aligned}$$

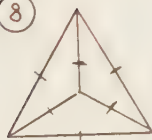
10. Fall (5, 1)



$$\begin{aligned} & \rightarrow CV_1 + CV_2 \\ & \rightarrow CV_1 - CV_2 \\ & \rightarrow CV_1 - CV_3 \end{aligned}$$

11. Fall (6)

8



alle Symmetrieeoperationen treten auf

Insgesamt also acht Fälle.

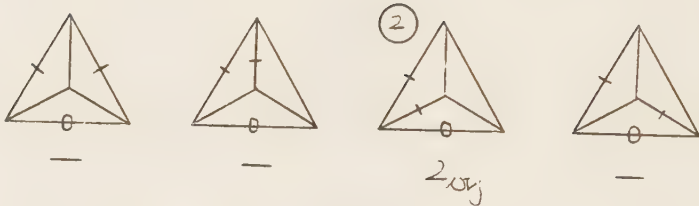
V_{II}

1. Fall (1, 1, 1, 1, 1)

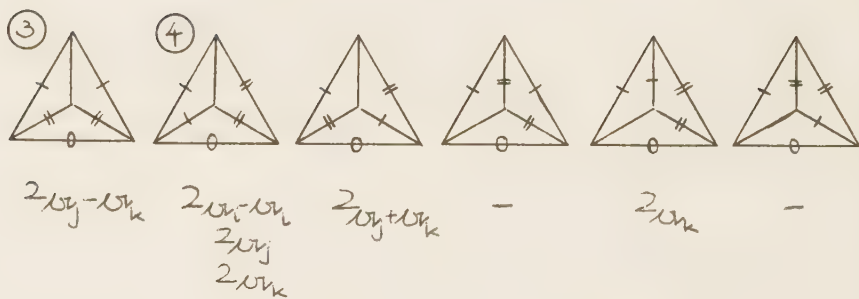
1



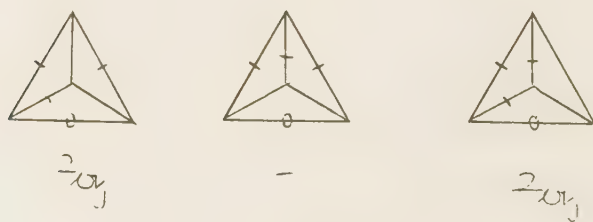
2. Fall (2, 1, 1, 1)



3. Fall (2, 2, 1)



4. Fall (3, 1, 1)



5. Fall (3, 2)



$$2\alpha_j$$



$$2\alpha_j - \alpha_k$$



$$\begin{aligned} 2\alpha_j \\ 2\alpha_k \\ 2\alpha_n - \alpha_n \end{aligned}$$

6. Fall (4, 1)

7. Fall (5)

⑤



alle Operationen



$$2\alpha_j$$



alle Operationen

Insgesamt also 5 Fälle.

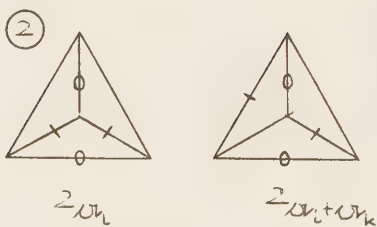
V_{III}

1. Fall (1, 1, 1, 1)

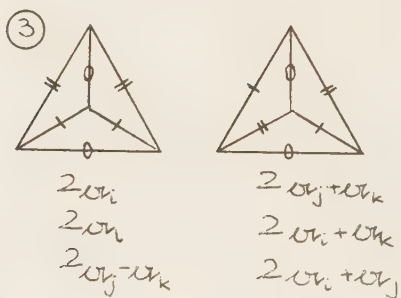
①



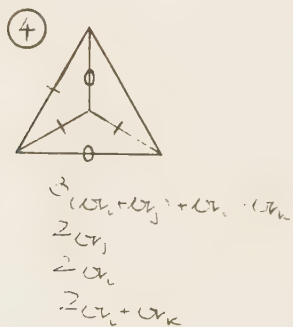
2. Fall (2, 1, 1)



3. Fall (2, 2)



4. Fall (3, 1)



5. Fall (4)

(5)



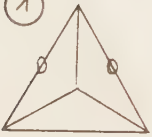
alle Symmetrieeoperationen

Insgesamt 5 Fälle,

V_{IV}

1. Fall (1,1,1,1)

(1)



$2C_2$

2. Fall (2, 1, 1)

(2)



$2C_2$

$2C_2 + C_2$

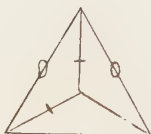
$2C_2 - C_2$



$2C_2$

$2C_2$

$2C_2 + C_2$

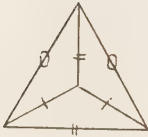


$2C_2$

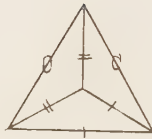


$2C_2$

3. Fall (2, 2)



$$\begin{aligned} 2v_n \\ 2v_j + v_k \\ 2v_j - v_k \end{aligned}$$



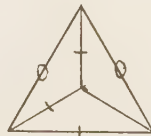
$$\begin{aligned} 2v_n \\ 2v_k \\ 2v_j + v_k \end{aligned}$$

4. Fall (3, 1)

(3)

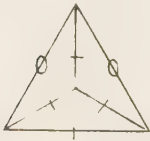


$$\begin{aligned} 2v_n \\ 2v_j + v_k \\ 2v_j - v_k \end{aligned}$$



$$\begin{aligned} 2v_n \\ 2v_j \\ 2v_k + v_j \end{aligned}$$

5. Fall (4)

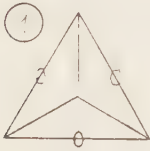


alle Operationen

Insgesamt 3 Fälle

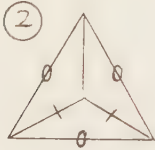
V_V

1. Fall (1, 1, 1)



$$\begin{aligned} & \sim V_1 \\ & \sim V_2 \\ & \sim V_3 \end{aligned}$$

2. Fall (2, 1)



$$\begin{aligned} & 4V_1 \quad 2V_2 + V_3 \\ & 2V_1 \quad 2V_2 - V_3 \\ & 2V_1 \quad 2V_2 \\ & 2V_1 \quad 2V_3 \end{aligned}$$

3. Fall (3)



alle Operationen

Insgesamt 3 Fälle

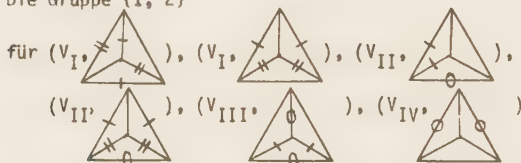
3.7. Die Symmetriegruppen der Wirkungsbereiche

Betrachtet man für die abgeleiteten Typen von Wirkungsbereichen die zugehörigen Symmetriegruppen, so stellt man fest, daß nicht jeder Typ eine eigene Symmetriegruppe besitzt, sondern nur sieben verschiedene Drehgruppen existieren:

1. Die Gruppe $\{1\}$

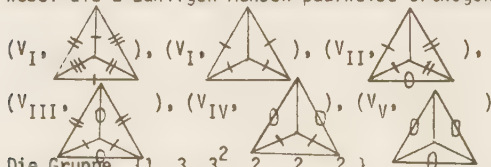


2. Die Gruppe $\{1, 2\}$



3. Die Gruppe $\{1, 2_\alpha, 2_\beta, 2_\gamma\}$,

wobei die 2-zähligen Achsen paarweise orthogonal sind.



4. Die Gruppe $\{1, 3, 3^2, 2_\alpha, 2_\beta, 2_\gamma\}$

wobei die 2-zähligen Achsen senkrecht auf der 3-zähligen stehen und untereinander Winkel von 120° bilden.



5. Die Gruppe $\{1, 4, 4^2, 4^3, 2_{\alpha_1}, 2_{\alpha_2}, 2_{\beta_1}, 2_{\beta_2}\}$

wobei die zweizähligen Achsen senkrecht auf der 4-zähligen Achse stehen und $2_{\alpha_1} \perp 2_{\alpha_2}$, $2_{\beta_1} \perp 2_{\beta_2}$ und $\angle (2_{\alpha_1}, 2_{\beta_1}) = 45^\circ$.



6. Die Gruppe $\{1, 6, 6^2, 6^3, 6^4, 6^5, 2_{\alpha_1}, 2_{\alpha_2}, 2_{\alpha_3}, 2_{\beta_1}, 2_{\beta_2}, 2_{\beta_3}\}$

wobei die zweizähligen Achsen senkrecht auf der sechszähligen stehen und die $2_{\alpha_1}, 2_{\alpha_2}, 2_{\alpha_3}$ bzw. $2_{\beta_1}, 2_{\beta_2}, 2_{\beta_3}$ paarweise Winkel von 120° bilden und $\angle (2_{\alpha_1}, 2_{\beta_1}) = 60^\circ$ ist.



7. Die Gruppe

bestehend aus drei paarweise orthogonalen vierzähligen Achsen, vier dazu raumdiagonal liegenden dreizähligen Achsen und sechs flächendiagonalen zweizähligen Achsen.



Dieser Sachverhalt suggeriert die Einführung symmetriebezogener Koordinatensysteme, damit die Beschreibung der Symmetriegruppen durch Matrizen vereinfacht wird. Außerdem wird dadurch die Grundlage für eine zweckmäßige Punktgruppennomenklatur geschaffen.

3.8. Kristallographische Blickrichtungen

Durch die Drehachsen der Wirkungsbereiche werden Raumrichtungen ausgezeichnet. Existieren mehrere Drehachsen, so tritt der Fall ein, daß durch eine Drehachse zwei andere Drehachsen aufeinander abgebildet werden, solche Drehachsen sind dann symmetrisch äquivalent. Die Menge der Drehachsen jeder der sieben Gruppen zerfällt in maximal drei Klassen symmetrisch äquivalenter (d.h. in der Gruppe konjugierter) Drehachsen. Die Scharen der äquivalenten Richtungen werden als Blickrichtungen bezeichnet. Diese Blickrichtungen werden zur Definition der symmetriebezogenen Koordinatensysteme herangezogen. Die Nomenklatur der Gruppen besteht dann darin, für die drei Blickrichtungen, die in ihnen liegenden Symmetrieachsen anzugeben.

Die erste Gruppe besitzt keine Blickrichtung; man behält daher die reduzierte Basis bei und nennt die Gruppe 1, da sie nur das Element enthält. (triklin)

Die zweite Gruppe enthält eine Blickrichtung, die Richtung der zweizähligen Achse. Die beiden anderen Basisvektoren werden in der dazu senkrechten Netzebene des Gitters gewählt, so daß die Masche aus kürzesten stumpfwinkligen Vektoren besteht. Die Blickrichtung wird als y-Richtung bezeichnet und die zweizählige Achse als 2y (monoklin). Die Gruppe wird durch 2 bezeichnet.

Die dritte Gruppe enthält drei Blickrichtungen, die orthogonalen Richtungen x, y, z mit den Drehachsen 2_x , 2_y , 2_z und dem Gruppensymbol 222 (orthorhombisch).

Die vierte Gruppe besitzt zwei Blickrichtungen, die Richtung der dreizähligen Achse und die drei Richtungen der dazu senkrechten zweizähligen Achsen. Für die Basiswahl bietet sich als z-Richtung zunächst die Richtung der dreizähligen Achse 3_z an; dann wählt man zwei der im Winkel von 120° stehenden zweizähligen Achsen als weitere

Basisvektoren. Diese Basiswahl führt auf ein Raumgitter, das die Symmetrie der sechsten Gruppe besitzt und auch deren Wirkungsbe-
reich. Um das tatsächlich zugrundeliegende Gitter zu beschreiben,
muß man zusätzliche Gittervektoren einführen, die nicht ganzzahlige
Komponenten bzgl. dieser Basis besitzen; man spricht dann von einer
zentrierten Darstellung des Gitters. Diese Komplikation kann man
in diesem Fall vermeiden, indem man drei symmetrisch um die 3-zählige
gelagerte Vektoren als Basisvektoren wählt, die eine primitive Zelle
aufspannen. Dieses Parallelepiped ist ein Rhomboeder, dessen Raum-
diagonale die dreizählige Achse bildet. Diese Basis definiert das
rhomboedrische Achsenkreuz und die Gruppe wird entsprechend durch
32 bezeichnet.

Die fünfte Gruppe besitzt drei Blickrichtungen; die erste ist die
Richtung z der vierzähligen Achse 4_z . Die zweite Blickrichtung ent-
hält ein Paar dazu senkrecht stehender zweizähliger Achsen 2_x , 2_y ,
die miteinander einen rechten Winkel bilden. Die drei Richtungen
definieren zusammen das tetragonale Achsenkreuz. Die dritte Blick-
richtung besteht aus den flächendiagonalen zweizähligen Achsen 2_{xy}
und $2_{\bar{xy}}$. Die Gruppe wird entsprechend durch 422 bezeichnet.

Die sechste Gruppe besitzt als erste Blickrichtung die Richtung z
der sechszähligen Achse. Die zweite Blickrichtung wird durch drei
dazu senkrechte zweizählige Achsen mit paarweisem 120° -Winkel be-
stimmt. Durch die z -Richtung und zwei dieser zweizähligen Achs-
richtungen ist eine Basis des Gitters bestimmt. Die restlichen
drei zweizähligen Achsen liegen um 30° dazu gedreht. Die Gruppe
wird daher durch 622 bezeichnet. (hexagonal).

Die siebente Gruppe besitzt als erste Blickrichtung die drei Richtungen
der vierzähligen Achsen. Diese Achsen werden als Koordinatenachsen
verwendet. Die zweite Blickrichtung besteht aus den Richtungen der

vier dreizähligen Achsen, die raumdiagonal liegen; die dritte Blickrichtung enthält die sechs symmetrisch äquivalenten flächendiagonalen zweizähligen Achsen. Das Gruppensymbol lautet dementsprechend 432.

Durch diese symmetrienormierte Basiswahl wird die Zahl der zur Symmetriebeschreibung erforderlichen Matrizen sehr klein gehalten; die auftretenden Drehachsen sind

1	2_x	3_z	4_z	6_z
	2_y	3_{xxx}	4_x	6_z^5
	2_z	3_{xxx}^-	4_y	
	2_{xh}	3_{xxx}^-	4_z^3	
	2_{yh}	3_{xxx}^-	4_x^3	
	$2_{yz}^2 2_{xy}$	3_z^2	4_y^3	
	$2_{xz}^2 2_{xy}^-$	3_{xxx}^2		
	2_{xz}^-	3_{xxx}^2		
	2_{yz}^-	3_{xxx}^2		
	2_{2xy}	3_{xxx}^2		
	2_{x2y}			

32 Matrizen

Die Indizes sind verkürzte Parameterdarstellungen der Achsrichtungen. Nur 2_{xh} und 2_{yh} bedürfen einer Erläuterung: es handelt sich um Drehachsen in der hexagonalen x- bzw. y-Richtung - ihre Matrizen unterscheiden sich von den 2_x bzw. 2_y Matrizen in orthogonalen Koordinatensystemen.

3.9. Kristallographische Holoedrien

Vervollständigt man die Symmetriegruppen der Wirkungsbereiche durch die Zentrosymmetrieoperation $\bar{1}$, so erhält man eine weitere Liste

von Matrizen, die Matrizen der mit $\bar{1}$ multiplizierten Drehungen. Diese werden durch die Drehachse mit einem Querstrich darüber bezeichnet; nur im Fall der Drehachse 2 entstehen Drehinversionen, die geometrisch als Spiegelungen an einer Ebene, deren Normalenrichtung die zweizählige Achse angibt, interpretiert werden. Sie erhalten ein eigenes Symbol m .

$\bar{1}$	m_x	$\bar{3}_z$	$\bar{4}_z$	$\bar{6}_z$
	m_y	$\bar{3}_{xxx}$	$\bar{4}_x$	$\bar{6}_z^5$
	m_z	$\bar{3}_{xxx}$	$\bar{4}_y$	
	m_{xh}	$\bar{3}_{xxx}$	$\bar{4}_z^3$	
	m_{yh}	$\bar{3}_{xxx}$	$\bar{4}_x^3$	
	m_{xy}	$\bar{3}_z^5$	$\bar{4}_y^3$	
	m_{yz}	$\bar{3}_{xxx}^5$		
	m_{xz}	$\bar{3}_{xx\bar{x}}^5$		
	$m_{x\bar{y}}$	$\bar{3}_{xxx}^5$		
	$m_{x\bar{z}}$	$\bar{3}_{xxx}^5$		
	$m_{y\bar{z}}$			
	m_{2xy}			
	m_{x2y}			

Die vollen Symmetriegruppen der Wirkungsbereiche können ebenfalls durch Angabe der in den verschiedenen Blickrichtungen vorhandenen Symmetrieeoperationen bezeichnet werden. Die sieben Symmetriegruppen werden die kristallographischen Holoedrien genannt und haben die Symbole

$\bar{1}$	(Drehgruppe 1)
$2/m$	(Drehgruppe 2)
$2/m \ 2/m \ 2/m$	(Drehgruppe 222)
$\bar{3} \ 2/m$	(Drehgruppe 32)
$4/m \ 2/m \ 2/m$	(Drehgruppe 422)
$6/m \ 2/m \ 2/m$	(Drehgruppe 622)
$4/m \ \bar{3} \ 2/m$	(Drehgruppe 432)

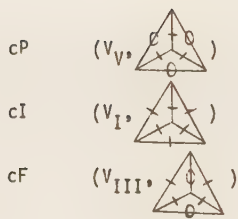
Dabei wird die in der zyklischen Gruppe $\bar{3}$ vorhandene Achse 3 nicht eigens notiert, ebenso die in $4/m$ enthaltene Inversionsachse $\bar{4}$. Die Schreibweise Drehachse/Spiegelebene soll besagen, daß die Richtung der Drehachse und der Spiegelebenennormale übereinstimmen. Die Bezeichnungsweise kann etwas verkürzt werden, wenn man nur erzeugende Operationen und solche Operationen aufnimmt, die die Blickrichtung charakterisieren. Dabei werden im Hinblick auf eine spätere Raumgruppennomenklatur die Spiegelebenen als Erzeugende bevorzugt. Man erhält die Kurzsymbole $\bar{1}$, $2/m$, mmm , $\bar{3}m$, $4/m\bar{m}$, $6/m\bar{m}$, $m\bar{3}m$.

3.10. BRAVAIS-Gitter

Die Einführung der symmetriebezogenen Koordinatensysteme hat für die Gitterbeschreibung eine Konsequenz, die es gestattet, Symmetrietypen von Gittern zu unterscheiden. In 3.6. wurden die 24 symmetrischen Sorten von Wirkungsbereichen abgeleitet. Beschreibt man nun die zugehörigen Gitter von ihrem symmetriebezogenen Koordinatensystem aus, so sind in vielen Fällen nicht mehr alle Gittervektoren als ganzzahlige Linearkombinationen der Basisvektoren zu gewinnen. Es treten sogenannte "Zentrierungen" auf, d. h. Gitterpunkte auf den Flächenmitten oder in der Mitte der Elementarzelle. Man kann die Gitter daher neben ihrer Symmetrie durch ihren Zentrierungstyp unterscheiden. Zwei Gitter gehören zum gleichen BRAVAIS-Typ, wenn sie die gleiche Holoedrie als Symmetriegruppe besitzen und bzgl. ihrer symmetriebezogenen Basis die gleiche Zentrierung besitzen. Die BRAVAIS-Gitter werden durch die Buchstaben a, m, o, r, t, h, c für anorthisch = triklin, monoklin, orthorhombisch, rhomboedrisch, tetragonal, hexagonal, kubisch für die Holoedrie bezeichnet und die Buchstaben P, A, B, C, I, F, (R) für die Zentrierungen, dabei steht A für die Zentrierung der Flächenmitten der von $\sqrt{2}$ und $\sqrt{3}$ erzeugten Fläche usw.,

I für die räumliche Zentrierung, F für die Zentrierung sämtlicher Flächen und R für die Zentrierung, die bei der Beschreibung des rhomboedrischen Gitters rP bzgl. einer hexagonalen Basis auftritt. Die 24 symmetrischen Sorten verteilen sich auf 14 BRAVAIS-Typen:

aP	(V_I , ) , (V_{II} , ) , (V_{III} , )
mP	(V_{IV} , )
mC	(V_I , ) , (V_I , ) , (V_{II} , ) , (V_{II} , ) (V_{III} , )
oP	(V_V , )
oC	(V_{IV} , )
oI	(V_I , ) , (V_{II} , ) , (V_{III} , )
oF	(V_I , )
rP $\equiv$ hR	(V_I , ) , (V_{III} , )
tP	(V_V , )
tI	(V_I , ) , (V_{II} , )
hP	(V_{IV} , )



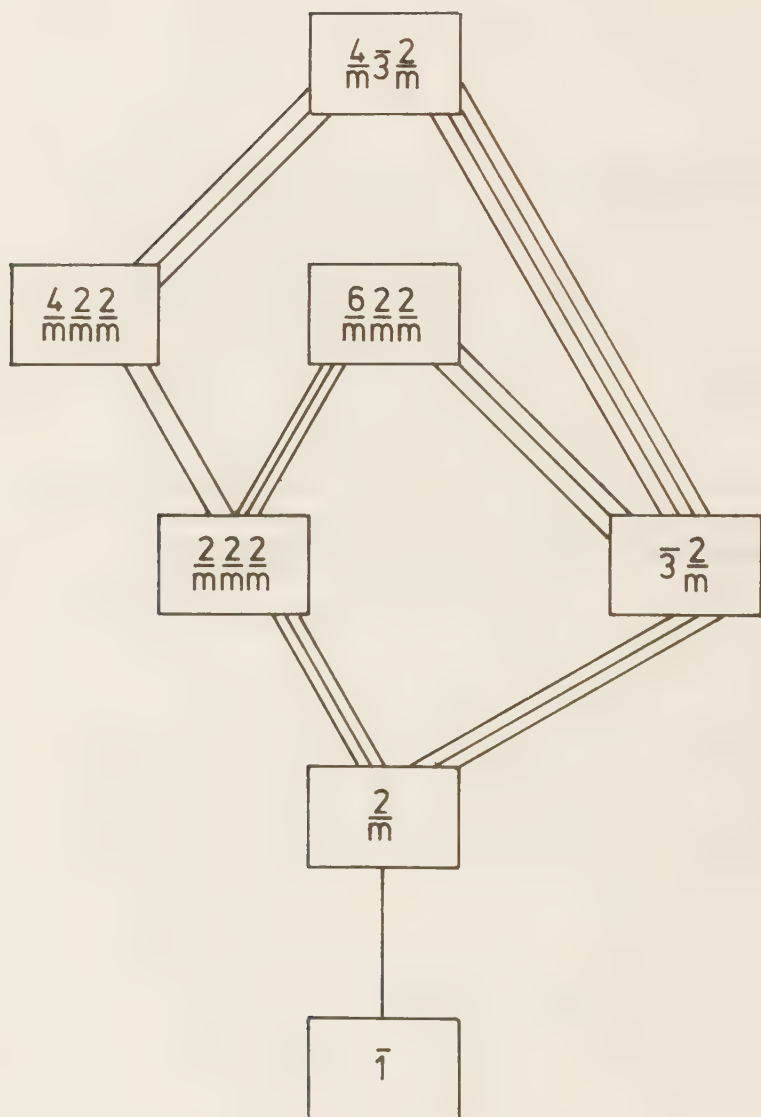
4. Kristallographische Punktgruppen

Die Symmetriegruppen der regulären Punktsysteme sind die Raumgruppen.

In dem vorangegangenen Abschnitt wurden die Symmetriegruppen einzelner Punkte von Gittern untersucht und vollständig abgeleitet. Es sind dies die sieben Punktsymmetriegruppen der Gitter. Fragt man allgemeiner, welche Punktsymmetrien können reguläre Punktsysteme besitzen, d.h. unter welchen Operationen der Raumgruppe bleibt ein Punkt fest, so gibt der Satz 5.1. im Abschnitt über Raumgruppenbeschreibung eine stark einschränkende Antwort: die rotativen Anteile der Raumgruppenoperationen müssen Symmetrieeoperationen des zugrundeliegenden Translationsgitters sein. Die Punktsymmetriegruppen regulärer Punktsysteme müssen daher stets Untergruppen der Holoeidrien sein. Ihre eigenständige Bedeutung haben diese Gruppen bei der Symmetriebeschreibung der Flächen von Kristallpolyedern. Der folgende Abschnitt dient daher der Ableitung der Untergruppen der sieben Holoeidrien.

4.1. Untergruppenbeziehungen der Holoeidrien

Durch Überprüfen der Enthaltenseinsrelationen erhält man für die sieben Holoeidrien das folgende Untergruppendiagramm; dabei sind mehrere Linien gezeichnet, wenn dieselbe Untergruppe in verschiedenen Orientierungen auftritt (d.h. verschiedene zueinander konjugierte Versionen).



4.2. Systemgleiche Untergruppen

Die Untersuchung der Untergruppen der Holoedrien kann in zwei Stufen erfolgen. Eine Untergruppe $\mathcal{U}$ einer Holoedrie $\mathcal{H}_1$ kann gleichzeitig Untergruppe einer Unterholoedrie $\mathcal{H}_2 \subseteq \mathcal{H}_1$ sein. Dann ist es zur Ableitung sämtlicher Untergruppen überflüssig, die Gruppe $\mathcal{U}$ sowohl als Untergruppe von $\mathcal{H}_1$ als auch von $\mathcal{H}_2$ abzuleiten, da sie als Untergruppe von $\mathcal{H}_2$ stets Untergruppe von $\mathcal{H}_1$ ist. Man ordnet also jede Untergruppe der kleinsten Holoedrie zu, in der sie noch enthalten ist.

In der Tabelle 3.6. waren zu jeder Symmetrieeoperation die zugehörigen metrischen Bedingungen anhand des SELLING-Vierseits angegeben. Für jede Untergruppe $\mathcal{U}$ kann man nun das von den Symmetrieeoperationen erzeugte spezielle SELLING-Vierseit betrachten und stellt fest, daß es sich stets um das SELLING-Vierseit einer Holoedrie handelt, da durch die metrischen Bedingungen des SELLING-Vierseits ein Gitter mit einer zugehörigen Holoedrie bestimmt wird. Die Punktgruppen werden also durch ihre SELLING-Vierseite den Holoedrien zugeordnet. Jede solche Klasse von Untergruppen, die einer Holoedrie zugeordnet sind, heißt ein Kristallsystem. Zwei Punktgruppen des gleichen Kristallsystems sollen systemgleich genannt werden.

Um alle kristallographischen Punktgruppen aufzufinden, genügt es, für die sieben Kristallsysteme die systemgleichen Untergruppen aufzusuchen. Die weiteren Untergruppenbeziehungen findet man dann einfach durch Überprüfung der Enthaltenseinsrelationen zwischen diesen Gruppen.

4.3. HERMANN-HAUGUIN-Symbole der Punktgruppen

Die systemgleichen Untergruppen einer Holoedrie sind sehr leicht zu beschreiben, indem man das Symbol der Holoedrie betrachtet und in

den verschiedenen Blickrichtungen nur die in der Untergruppen vorhandenen erzeugenden Symmetrieelemente notiert. Das ist stets möglich, da Ober- und Untergruppe das gleiche SELLING-Vierseit und damit das gleiche Blickrichtungssystem besitzen.

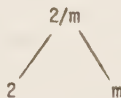
4.4. Trikline systemgleiche Untergruppen

$\bar{1}$ hat als zyklische Gruppe der Ordnung 2 nur die Einsgruppe als Untergruppe. Sie wird durch 1 bezeichnet.



4.5. Monokline systemgleiche Untergruppen

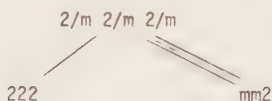
Die monokline Holoedrie $2/m$ ist von der Ordnung 4. Die systemgleichen Untergruppen besitzen daher die Ordnung 2, sie müssen eine Richtung auszeichnen, deshalb entfällt $\bar{1}$. Es verbleiben die zyklischen Gruppen 2 und m.



4.6. Orthorhombische systemgleiche Untergruppen

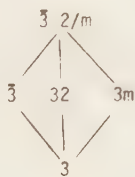
Die orthorhombische Holoedrie $2/m \ 2/m \ 2/m$ hat die Ordnung 8; alle zyklischen Untergruppen der Ordnung 2 können, da sie von einem zweizähligen Element erzeugt sind, höchstens monoklin sein. Nur Untergruppen der Ordnung 4 können orthorhombisch sein. Da mindestens zwei Blickrichtungen besetzt sein müssen, entfällt $2/m$. Da in jeder Blickrichtung nur 2 und /oder m vorkommen kann erhält man die systemgleichen Untergruppen 222 , $mm2$, $m2m$ und $2mm$ wobei die drei letzten äquivalent sind, da sie durch Umbenennung der Achsen inein-

ander zu überführen sind.



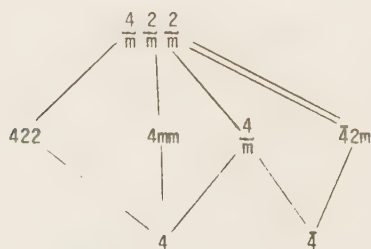
4.7. Rhomboedrische systemgleich Untergruppen

Die rhomboedrische Holoedrie $\bar{3} 2/m$ hat die Ordnung 12, ihre Untergruppen können nach dem Satz von CAYLEY daher nur die Ordnungen 1, 2, 3, 4 und 6 besitzen. Die erste Blickrichtung muß drei- bzw. sechszählig besetzt sein (ist sie nicht besetzt, so kann nur ein Element der zweiten Richtung vorhanden sein, was auf eine monokline Gruppe führt); daher muß die Punktgruppenordnung durch drei teilbar sein - also kommen nur die Ordnungen 3 und 6 in Frage. Die erste Blickrichtung kann mit 3 oder $\bar{3}$ besetzt sein, also gibt es die Untergruppen 3 und $\bar{3}$. Die zweite Blickrichtung kann zusätzlich 2 oder m enthalten. Da in $\bar{3}$ $\bar{1}$ enthalten ist, erhält man bei Hinzufügung von 2 oder m sofort $\bar{3} 2/m$. Deshalb kann in Untergruppen mit besetzter zweiter Blickrichtung nur 3 in der ersten Blickrichtung vorkommen. Man erhält die Untergruppen 32 und 3m.



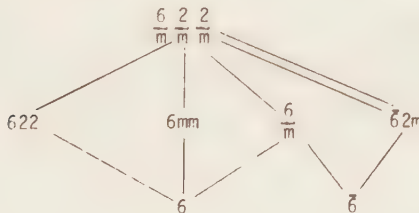
4.8. Tetragonale systemgleiche Untergruppen

Die tetragonale Holoedrie $4/m \ 2/m \ 2/m$ hat die Ordnung 16. Die Untergruppen können nach dem CAYLEYschen Satz nur Ordnungen 1, 2, 4 und 8 besitzen. Die Untergruppen der Ordnung 2 können höchstens monoklin sein, also verbleiben Gruppen der Ordnung 4 und 8. Eine Untergruppe, die keine vierzählige Operation enthält, kann nicht systemgleich sein, da in diesem Fall höchstens die zweite oder die dritte Blickrichtung besetzt sein kann, was stets auf eine höchstens orthorhombische Untergruppe führt. Die erste Blickrichtung kann daher folgendermaßen besetzt sein: durch 4, $\bar{4}$ und $4/m$. Sind die anderen Blickrichtungen nicht besetzt, so erhält man 4, $\bar{4}$ und $4/m$ als Untergruppen. Ist die zweite oder dritte Blickrichtung zusätzlich mit $2/m$ besetzt, so wird sofort $4/m \ 2/m \ 2/m$ erzeugt, wie man leicht ausrechnet. Aus der ersten und zweiten Blickrichtung werden die Symmetrieeoperationen der dritten Blickrichtung bestimmt. Daher gibt es weiterhin die Untergruppen 422 , $4mm$, $\bar{4}2m$, $\bar{4}m2$; Jede Erweiterung von $4/m$ ergibt sofort $4/m \ 2/m \ 2/m$. $\bar{4}2m$ und $\bar{4}m2$ sind durch Vertauschung von 2. und 3. Blickrichtung ineinander zu transformieren. Man erhält also die folgenden systemgleichen Untergruppenbeziehungen:



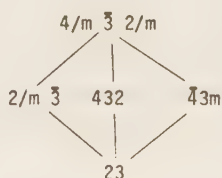
4.9. Hexagonale systemgleiche Untergruppen

Die hexagonale Holoedrie $6/m \ 2/m \ 2/m$ hat die Ordnung 24. Nach dem CAYLEYschen Satz werden die Untergruppenordnungen auf 1, 2, 3, 4, 6, 8 und 12 eingeschränkt. Ist die zweite und dritte Blickrichtung besetzt, so wird stets eine Operation der Ordnung 6 in der ersten Blickrichtung erzeugt. Ist keine von beiden besetzt, so muß in der ersten Blickrichtung eine Operation der Ordnung 6 vorliegen, weil sonst nur eine höchstens rhomboedrische oder monokline Gruppe vorläge. Ist nur die zweite und nicht die dritte Blickrichtung besetzt, so ist dies nur dann möglich, wenn in der ersten Blickrichtung nur Operationen der Ordnung 2 oder 3 vorkommen, was eine rhomboedrische Gruppe zur Folge hätte. Also muß in der ersten Blickrichtung stets eine der Ordnung 6 stehen. Deshalb kann die Ordnung einer systemgleichen Untergruppe nur 6 oder 12 sein. Ist nur die erste Richtung besetzt, so kommen nur die Gruppen 6, $\bar{6}$ und $6/m$ in Frage. Die dritte Blickrichtung wird aus der ersten und zweiten erzeugt. $2/m$ in der zweiten Blickrichtung ergibt stets $6/m \ 2/m \ 2/m$. Deshalb gibt es nur die Untergruppen 622 , $6mm$, $\bar{6}2m$ und $\bar{6}m2$. Bei Vertauschung der zweiten und dritten Blickrichtung sind $\bar{6}2m$ und $\bar{6}m2$ äquivalent. Daraus ergeben sich die systemgleichen Untergruppenbeziehungen:



4.10. Kubische systemgleiche Untergruppen

Die kubische Holoedrie $4/m \bar{3} 2/m$ hat die Ordnung 48. Der Satz von CAYLEY gestattet Untergruppen der Ordnungen 1, 2, 3, 4, 6, 8, 12, 16 und 24. Enthält eine kubische Punktgruppe keine dreizählige Achse, so kann sie nur eine vierzählige Achse enthalten und wird höchstens tetragonal. Daraus folgt, daß nur die Ordnungen 3, 6, 12 und 24 für systemgleiche Untergruppen auftreten können. Dabei entfällt 3, weil das nur eine rhomboedrische Gruppe ergibt. Auch 6 ist keine kubische Punktgruppenordnung, weil durch Hinzufügen einer zweizähligen Operation entweder die rhomboedrische Gruppe 32 entsteht oder Gruppen die mindestens die Ordnung 12 besitzen. Die Besetzung der dritten Blickrichtung ergibt sich aus der ersten und zweiten, weshalb man durch einfaches kombinieren die Untergruppen 23 , $2/m \bar{3}$, 432 und $\bar{4}3m$ findet, also



4.11. Untergruppenschema

Das vollständige Untergruppenschema der Punktgruppen erhält man durch Überprüfen von Inklusionen.

5. Raumgruppenbeschreibung

In diesem Abschnitt sollen Eigenschaften von Raumgruppen hergeleitet werden, die zu einer Beschreibung und Klassifikation geeignet sind. Aufgrund der Untersuchungen im Abschnitt 4, bestimmt das Translationsgitter der Raumgruppe eine symmetriebezogene "BRAVAIS-Gitter-Basis". Diese soll bei der Beschreibung einer Raumgruppe stets zugrundegelegt werden.

5.1. Satz:

In jeder Raumgruppe $\mathcal{G}$ ist die Menge $\mathcal{T}$ aller Translationen (E, G) aus $\mathcal{G}$ ein Normalteiler, und ist (R, T) eine Raumgruppenoperation, so ist $(R, 0)$ eine kristallographische Punktgruppenoperation und Deckoperation des Gitters $\Gamma(\mathcal{T})$.

Beweis

Ist (E, G) eine beliebige Translation aus $\mathcal{G}$ und (R, T) eine beliebige Raumgruppenoperation, so ist

$$\begin{aligned} & (R, T) (E, G) (R, T)^{-1} \\ &= (R, RG + T) (R^{-1}, -R^{-1}T) \\ &= (E, RG) \end{aligned}$$

also ist $\mathcal{T}$ invariant unter Konjugation mit beliebigen Raumgruppenelementen, also ein Normalteiler.

Nach Definition der Raumgruppe bilden die Translationen ein dreidimensionales Gitter; nach obiger Gleichung ist R eine Deckoperation des Gitters, da mit G auch RG Gitterpunkt ist.

qed.

5.2. Bezeichnung

Nach Satz 5.1. bilden die den Raumgruppenoperationen $(R, T) \in \mathcal{G}$ zugeordneten Punktgruppenoperationen $(R, 0)$ eine kristallographische Punktgruppe des Translationengitters von $\mathcal{G}$. Diese Gruppe der rotativen Anteile soll mit $\mathcal{R}$ bezeichnet werden und wird auch Kristallklasse der Raumgruppe genannt.

5.3. Satz

Die Faktorgruppe $\mathcal{G} / \mathcal{Z}$ ist isomorph zu einer kristallographischen Punktgruppe.

Beweis

$$\mathcal{G} / \mathcal{Z} = \sum_{i \in I} (R_i, T_i)$$

wobei (R_i, T_i) ein Repräsentantensystem der Nebenklassen von $\mathcal{G}$ nach $\mathcal{Z}$ durchläuft. Gehören zwei Operationen (R_m, T_m) und (R_n, T_n) zur gleichen Nebenklasse, so gibt es eine Translation (E, T_k) , so daß

$$\begin{aligned} (R_m, T_m) &= (R_n, T_n) (E, T_k) \\ &= (R_n, R_n T_k + T_n) \text{ ist,} \end{aligned}$$

also ist $R_m = R_n$.

Sind umgekehrt (R, T_m) und (R, T_n) Raumgruppenoperationen, so ist

$$\begin{aligned} (R, T_m) (R, T_n)^{-1} &= (R, T_m) (R^{-1}, -R^{-1} T_n) \\ &= (E, T_m - T_n) \end{aligned}$$

also liegen (R, T_m) und (R, T_n) in der gleichen Nebenklasse. Zwei Raumgruppenoperationen liegen also genau dann in einer Nebenklasse,

wenn sie gleiche rotative Anteile besitzen.

Deshalb ist die Abbildung, die jeder Nebenklasse $(R, T) \in \mathcal{F}$ die Punktgruppenoperation $(R, 0)$ zuordnet eine eindeutige Abbildung der Faktorgruppe auf die Gruppe $\mathcal{R}$ der rotativen Anteile. Daß diese Abbildung ein Isomorphismus ist, sieht man sofort daraus, daß die Multiplikationsvorschriften der rotativen Anteile in $\mathcal{R}$ und $\mathcal{G}$ übereinstimmen.
qed.

5.4. Folgerung

Der Satz 5.2. ermöglicht die Reduktion der Beschreibung einer Raumgruppe $\mathcal{G} = \{(R_i, T_i) / i \in I\}$. Zunächst beschreibt man die Translationsgruppe $\mathcal{T}$ durch ein BRAVAIS-Gitter-Symbol und die metrischen Parameter der BRAVAIS-Gitterbasis, etwa die Einheitslängen und Winkel der Basisvektoren oder den zugehörigen metrischen Fundamentaltensor. Bezüglich der BRAVAIS-Gitterbasis ist die Beschreibung der Raumgruppe $\mathcal{G}$ unabhängig von den metrischen Bedingungen. Dann wählt man aus jeder Nebenklasse der Raumgruppe nach ihrem Translationsnormalteiler einen Repräsentanten (R_i, T_i) und zwar einen solchen mit

$$T_i = \begin{pmatrix} t^1 \\ t^2 \\ t^3 \end{pmatrix} \quad t^i \in \mathbb{Z}.$$

In jeder Nebenklasse liegt genau ein solcher Repräsentant. Bei der Behandlung zentrierter BRAVAIS-Gitter ist es zweckmäßig, nicht nach der vollen Translationsgruppe zu faktorisieren, sondern nur nach der zugehörigen primitiven Translationsgruppe. Man erhält dann für die Zentrierungen eigene Repräsentanten. Die volle Raumgruppe kann dann aus diesem endlichen Repräsentantensystem abgeleitet werden, indem man auf die translativen Anteile beliebige ganzzahlige Vektoren addiert. Man schreibt das Repräsentantensystem in geordneter Form auf, indem man in einer ersten Spalte die rotativen Anteile in der Form von Tripeln linearer Polynome notiert. Neben jeden rotativen Anteil schreibt man den translativen

Anteil in der Form eines Zeilenvektors. In zentrierten Raumgruppen wird für jede Zentrierung eine neue Spalte translativer Anteile notiert. Diese Darstellung einer Raumgruppe als Raumgruppenmatrix besteht also aus zwei Teilen

- 1) der Punktgruppenmatrix,
die die rotativen Anteile enthält und
- 2) der Lagekennstellenmatrix,
die die translativen Anteile enthält,

5.5. Äquivalente Raumgruppen

Ist $\mathcal{A}$ die Basis eines dreidimensionalen Gitters und $\mathcal{B}$ die Basis eines weiteren dreidimensionalen Gitters, so sind die Gitterbasen im allgemeinsten Fall durch eine Beziehung der Form

$$\begin{aligned}\mathcal{B} &= \mathcal{A}(A, S) \\ &= \mathcal{A}A + \mathcal{A}S\end{aligned}$$

verknüpft, wobei A eine (3×3) -Matrix mit nicht-verschwindender Determinante und S das Koordinatentripel eines Translationsvektors ist. Man fordert, daß die Rechtshändigkeit (Orientierung) der Gitterbasen erhalten bleiben soll, weshalb für A eine positive Determinante vorgeschrieben wird. Die Transformationen der Gitterbasen werden also bestimmt durch die Gruppe $\mathcal{U}^+$ der affinen Transformationen mit positiver Determinante.

Ist $\mathcal{G}_0$ eine Raumgruppe, deren Translationsgruppe $\mathcal{T}_0$ die symmetriebezogene Basis $\mathcal{A}$ besitzt und $\mathcal{G}$ eine Raumgruppe mit symmetriebezogener Gitterbasis $\mathcal{B}$, so kann man die beiden Raumgruppen mit Hilfe der affinen Transformation (A, S) vergleichen.

Ist (R, T) eine Symmetrieoperation in $\mathcal{G}$, so existiert zu jedem Punkt $\mathcal{C} = \mathcal{A}X$ ein symmetrisch gleichwertiger Punkt $\mathcal{C}' = \mathcal{A}(R, T)X$.

Herrschen in $\mathcal{G}$ dieselben Symmetrieverhältnisse wie in $\mathcal{G}_0$, so muß es bzgl. $\mathcal{B}$ ebenfalls ein Paar

$$\tilde{\mathcal{C}} = \mathcal{B} X, \quad \tilde{\mathcal{C}}' = \mathcal{B} (R, T) X$$

symmetrisch gleichwertiger Punkte geben. Bzgl. der Basis $\mathcal{A}'$ hat dieses Paar die Gestalt

$$\tilde{\mathcal{C}} = \mathcal{A} (A, S) X, \quad \tilde{\mathcal{C}}' = \mathcal{A} (A, S) (R, T) X$$

oder, wenn man $X_A = (A, S) X$ setzt:

$$\tilde{\mathcal{C}} = \mathcal{A} X_A, \quad \tilde{\mathcal{C}}' = \mathcal{A} (A, S) (R, T) (A, S)^{-1} X_A.$$

Bzgl. der Basis $\mathcal{A}$ hat die Symmetrieoperation $(R, T)_{\mathcal{A}}$ also die Form:

$$(R, T)_{\mathcal{A}} = (A, S) (R, T)_{\mathcal{B}} (A, S)^{-1}$$

$$\text{bzw.} \quad (R, T)_{\mathcal{B}} = (A, S)^{-1} (R, T)_{\mathcal{A}} (A, S).$$

Aufgrund dieses Sachverhaltes definiert man:

Zwei Raumgruppen $\mathcal{G}$ und $\mathcal{G}_0$ heißen äquivalent, wenn sie konjugiert sind in der Gruppe $\mathcal{U}^T$, d.h. wenn

$$\mathcal{G} = (A, S)^{-1} \mathcal{G}_0 (A, S)$$

gilt. Die Äquivalenzklassen der Raumgruppen sollen Raumgruppenklassen genannt werden, die einzelnen Raumgruppen sollen im Unterschied dazu Exemplare genannt werden.

5.6. Erzeugung der Raumgruppenklassen aus Repräsentanten

Hat man eine Raumgruppe $\mathcal{G}_0$ vorliegen und möchte eine Übersicht über sämtliche Exemplare der zugehörigen Raumgruppenklasse gewinnen, so liegt der Weg nahe, $\mathcal{G}_0$ mit sämtlichen Elementen von $\mathcal{U}^T$ zu konjugieren. Dieses Verfahren führt aber zu Komplikationen, da die Raumgruppensymmetrie mit Relationen zwischen den Gitterparametern gekoppelt ist. Eine

kubische Raumgruppe etwa kann nach Satz 5.1. nicht in einem monoklinen Koordinatensystem existieren. Eine Translation (E,S) ist demgegenüber völlig unproblematisch. Einschränkungen betreffen nur die Matrizen A, da das transformierte Koordinatensystem wieder ein Koordinatensystem des gleichen Kristallsystems sein muß. Ist F_A der metrische Fundamentaltensor zur Gitterbasis $\vec{a}$, so ist

$$F_B = A^t A = (A^t A)^t = A^t A = A^t F_A A$$

Die Matrizengruppe, die alle Transformationen enthält, die auf äquivalente Raumgruppen führen, wird also erzeugt von der Gruppe aller Translationen des Raumes und der Matrizengruppe des Kristallsystems, der Systemgruppe,

$$M = \{ A / F_B = A^t F_A A \quad \text{und } F_B \text{ beschreibt ein Koordinatensystem des gleichen Kristallsystems wie } F_A \}$$

5.7. Systemgruppen

Man findet die Systemgruppen, indem man die quadratischen Gleichungen

$$F_B = A^t F_A A$$

für jedes Kristallsystem löst ($\det A > 0$).

1. Kubisches System

$$F = \begin{pmatrix} a^2 & 0 & 0 \\ 0 & a^2 & 0 \\ 0 & 0 & a^2 \end{pmatrix}$$

Also muß gelten

$$\begin{pmatrix} b^2 & 0 & 0 \\ 0 & b^2 & 0 \\ 0 & 0 & b^2 \end{pmatrix} = A^t \begin{pmatrix} a^2 & 0 & 0 \\ 0 & a^2 & 0 \\ 0 & 0 & a^2 \end{pmatrix} A$$

$\Rightarrow A = \frac{b}{a} R$, wobei R eine beliebige Drehung ist, $\det A > 0$.

$\tilde{G}$ = Gruppe aller (starren) Drehungen

$c M = \{ \in (\mathbb{R}^3, \tilde{G})$ wobei $\in$ die von der in Klammern stehenden Menge erzeugte Gruppe bezeichnet. $\mathbb{R}^+ =$ Menge der reellen Zahlen ohne die 0.

2. Hexagonales System

$$h M = \{ \in (\mathbb{R}^3 E_{ab} + \mathbb{R}^+ E_c, \tilde{G})$$

3. Tetragonales System

$$t M = \{ \in (\mathbb{R}^3 E_{ab} + \mathbb{R}^+ E_c, \tilde{G})$$

4. Rhomboedrisches System

$$r M = h M \quad \text{in hexagonaler Beschreibung}$$

5. Orthorhombisches System

$$o M = \{ \in (\mathbb{R}^3 E_a + \mathbb{R}^+ E_b + \mathbb{R}^+ E_c, \tilde{G})$$

6. Monoklines System

$$m M = \{ \in (\mathbb{R}^3 E_b + \mathbb{C} V_{ac}^+, \tilde{G})$$

$^+_{ac}$ = alle affinen Transformationen A in der (a,c) -Ebene mit $\det A > 0$

7. Triklines System

$$a M = \mathbb{C} V^+$$

5.8. Das Problem der Normalaufstellung

Für die Beschreibung der Raumgruppen ist es zweckmäßig, in jeder Raumgruppenklasse einen Repräsentanten auszuzeichnen. Ein Schritt dazu ist bereits dadurch erfolgt, daß man verlangt hat, daß die Beschreibung der Raumgruppen bzgl. einer symmetriebezogenen Basis zu erfolgen hat. Bei der

Beschreibung durch Raumgruppenmatrizen sind zwei Raumgruppen mit gleicher Raumgruppenmatrix stets äquivalent. Es verbleiben aber zwei Probleme:

1. Durch die angegebene Normierung ist der Nullpunkt nicht festgelegt, d.h. die Raumgruppenmatrizen äquivalenter Raumgruppen, die durch eine Translation (E, S) konjugiert sind, besitzen unterschiedliche Raumgruppenmatrizen.
2. In einigen Kristallsystemen sind Koordinatenachsen symmetrisch gleich berechtigt ohne symmetrisch äquivalent zu sein etwa im orthorhombischen. Man kann eine eindeutige Zuordnung zu einer Raumgruppenmatrix nur dann gewinnen, wenn man Achsen willkürlich auszeichnet. Dies ist aber nicht immer zweckmäßig, da etwa bei der Betrachtung von Untergruppen orthorhombische Untergruppen in nicht "normalaufgestellter" Form auftreten.

In beiden Fällen liegt also das Problem vor, durch zusätzliche Normierungen eine Raumgruppenmatrix für eine Raumgruppenklasse auszuzeichnen. Die später zu beschreibende HERMANN-MAUGUINSche Raumgruppennomenklatur löst das Problem einer nullpunktsunabhängigen Raumgruppenbeschreibung; um aber die Raumgruppe aus dem Symbol zu konstruieren, muß man wiederum Nullpunktsnormierungen treffen. Die SCHOENFLIESsche Raumgruppennomenklatur ist zwar eine reine Raumgruppenklassenbenennung, enthält aber nicht die Möglichkeit, die Raumgruppe konstruktiv aus dem Symbol zu entwickeln. Sie soll deshalb hier nicht verwendet werden. Für die Benutzung der Raumgruppen ist es zweckmäßig, nicht total zu normieren, sondern mehrere Repräsentanten zuzulassen. Von den Matrizengruppen verbleiben dann Untergruppen, die die Äquivalenz vermitteln.

5.9. Geeignete Äquivalenzuntergruppen

Im triklinen System ist eine solche Untergruppe nicht erforderlich, da die Symmetrieelemente keine ausgezeichneten Richtungen besitzen.

Im monoklinen System ist die Gruppe der Achsnermutationen zweckmäßig, da die Festlegung der y-Achse als auszeichneter Richtung willkürlich ist. Da monokline Symmetrie in höhersymmetrischen Kristallsystemen auch flächendiagonal möglich ist, kann für diese Betrachtungen auch eine Gitterdrehung um 45° bzw. 30° zweckmäßig sein.

Im orthorhombischen System ist die Gruppe der Achsnermutationen erforderlich und ebenfalls für höhere Symmetriegruppen die Gitterdrehung um 45° bzw. 30° .

Im rhomboedrischen System ist die Gruppe der Achsnermutationen nützlich, da im kubischen System rhomboedrische Symmetrie in allen Raumdiagonalen auftreten kann.

Im hexagonalen, tetragonalen System können bei speziellen Untergruppenbetrachtungen Gitterdrehungen um 30° bzw. 45° zweckmäßig sein.

Im kubischen System sind keine Transformationen erforderlich.

5.10. Das Problem der Nullpunktwahl

Zur Behandlung des Nullpunktsproblems kann man sich zunächst eine erhebliche Vereinfachung verschaffen durch den folgenden Satz:

Zu jeder Raumgruppe G existiert ein Gitter $\Gamma_G(G)$, das unter allen Operationen von G auf sich abgebildet wird. Es ist geometrisch ähnlich zu dem Gitter $\Gamma(G)$, gehört also insbesondere zum gleichen BRAVAIS-Gitter-Typ.

Beweis

Es sei $R = G/H$ die Gruppe der rotativen Anteile der Operationen von G und $R_0 \in R$; es sei $m = \text{ord}(R)$. Nimmt die Variable x nacheinander als Werte die Operationen von R an, so durchläuft

$Y = R_0 X$ ebenfalls die Gruppe $\mathcal{R}$ (Gruppentafel).

Aus jeder Restklasse $(R, T) \in \mathcal{R}$ wählt man zu dem rotativen Anteil R einen translativen Anteil T_R ; der translative Anteil von R_0 soll auch mit T_0 bezeichnet werden. Es ist dann

$$\begin{aligned}(R_0, T_0) (X, T_X) &= (R_0 X, R_0 T_X + T_0) \\ &= (Y, T_Y) + (E, G_Y)\end{aligned}$$

für beliebiges X , wobei (E, G_Y) ein Element von $\mathcal{R}$ ist, also bzgl. einer primitiven Gitterbasis ein ganzzahliges Koordinatentripel.

Also ist

$$R_0 T_X + T_0 = T_Y + G_Y.$$

Schreibt man diese Gleichung für alle $X \in \mathcal{R}$ auf und addiert, so erhält man:

$$\sum_{X \in \mathcal{R}} R_0 T_X + m T_0 = \sum_{Y \in \mathcal{R}} T_Y + \sum_{Y \in \mathcal{R}} G_Y$$

oder, wenn

$$U = \frac{1}{m} \sum_{X \in \mathcal{R}} T_X \text{ ist und } G = \sum_{Y \in \mathcal{R}} G_Y$$

$$R_0 U + T_0 = U + \frac{1}{m} G$$

Nimmt man nun eine Nullpunktverschiebung des Koordinatensystems vor:

$$X' = X - U,$$

so geht die Gleichung

$$\tilde{X} = R_0 X + T_0$$

über in

$$\tilde{X} + U = R_0(X^* + U) + T_0,$$

also

$$\tilde{X} = R_0 X^* + R_0 U - U + T_0.$$

Nach obiger Gleichung ist

$$R_0 U - U + T_0 = \frac{1}{m} G \quad \text{mit } G \in \mathbb{Z}^3.$$

R_0 war beliebig gewählt und U unabhängig von R_0 konstruiert, daher gilt dies für beliebige $R_0 \in \mathbb{Q}$.

Nach dieser Nullpunktverschiebung um U sind also sämtliche translative Anteile T von Raumgruppenoperationen $(R, T) \in \mathcal{L}_g$ von der Form

$$T = \frac{1}{m} G \quad G \in \mathbb{Z}^3.$$

Dies hat zur Folge, daß das Gitter

$$\Gamma_0(\mathcal{L}_g) = \left\{ \frac{1}{m} G / G \in \mathbb{Z}^3 \right\}$$

unter allen Raumgruppenoperationen von $\mathcal{L}_g$ auf sich abgebildet wird. Die geometrische Ähnlichkeit folgt sofort aus der Konstruktion.

qed.

Der Beweis des Satzes enthält eine Vorschrift, wie man zu jeder Raumgruppe einen geeigneten Verschiebungsvektor finden kann, so daß alle translative Anteile nur noch rationale Komponenten enthalten. Damit ist das Problem der Nullpunktswahl auf ein endliches Problem reduziert. Weitere Normierungen folgen aus Forderungen über die relative Lage der Symmetrieelemente bzgl. des Nullpunktgitters z.B. besonders hohe Symmetrie im Nullpunkt. Solche Fragen werden aber zweckmäßig im Zusammenhang mit der Behandlung spezieller Raumgruppenklassen erörtert.

5.11. Lagestellen- und Kennstellenvektor

Ist (R, T) eine Raumgruppenoperation und $R^n = E$, so ist

$$(R, T)^n = (E, R^{n-1}T + R^{n-2}T + \dots + RT + T).$$

Zerlegt man nun $T = T_K + T_L$, wobei T_K die Projektion von T auf das Fixpunktgebilde von R ist, so gilt

$$(R, T)^n = (E, R^{n-1}T_K + \dots + T_K + R^{n-1}T_L + \dots + T_L).$$

Weil T_K im Fixpunktgebilde von R liegt, ist $R T_K = T_K$ für beliebige R . Ist n gerade so gibt es zu jedem R^i ein R^k mit $R^i T_L = -R^k T_L$, d.h. die Summe über die T_L -Anteile ist null. Im einzigen Ausnahmefall $n = 3$ ist die Summe der drei Anteile aber ebenfalls null. Also ist

$$(R, T)^n = (E, nT_K).$$

nT_K muß also ein Gittervektor sein und kann daher nur von der Form $\frac{1}{n}G$ mit einem Gittervektor G sein.

Hieraus leitet man die Klassifikation der Symmetrieelemente in Raumgruppen ab. Ist R eine Drehung, so gibt T_K die Schraubkomponente an, man verwendet die Symbole

$$\begin{array}{ll} 2, 2_1 & 3, 3_1, 3_2 \\ 4, 4_1, 4_2, 4_3 & 6, 6_1, 6_2, 6_3, 6_4, 6_5 \end{array}$$

Dabei soll n_m besagen, daß die Komponente von T_K in Achsrichtung gleich $\frac{m}{n}$ ist.

Ist R eine Spiegelung, so schreibt man

$$m, a, b, c, n, d$$

je nachdem ob die Gleitkomponenten $1/2$ in a, b, c oder zwei Richtungen gleichzeitig vorhanden sind (n) oder ob Gleitkomponenten $1/4$ auftreten (d).

Für alle anderen Symmetrieeoperationen sind die Fixpunktgebilde Punkte und $T_K = 0$. Der Vektor T_K wird Kennstellenvektor genannt. Der verbleibende Vektor T_L bestimmt die Lage des Symmetrieelements bzgl. des Nullpunkts; er steht orthogonal auf dem Fixpunktgebilde. Ist ein Symmetrieelement um einen Lagevektor L vom Nullpunkt entfernt, so hat die Symmetrieeoperation die Gestalt

$$Y = RX + T_K + (E - R) L$$

T_L ist also gegeben durch

$$T_L = (E - R) L$$

Hieraus kann man den Lagevektor L aus dem Lageanteilvektor T_L ermitteln und umgekehrt. Dies ist von Bedeutung für die Aufstellung des Symmetriegerüsts, also des Bildes der Anordnung der Symmetrieelemente im Raum.

5.12. HERMANN-MAUGUIN-Notation

Zur Beschreibung der Raumgruppen verwendet man zunächst die Symbole der BRAVAIS-Gitter und schreibt dahinter das HERMANN-MAUGUINSche Punktgruppensymbol, in dem die Symmetrie-Elemente die $T_K \neq 0$ besitzen durch die in 5.11. eingeführten Symbole ersetzt sind. Durch Angabe weniger Regeln über die Nullpunktswahl und Normalaufstellung kann man aus dem Symbol eine Raumgruppenmatrix und daraus das Symmetriegerüst ableiten.

6. Untergruppen der Raumgruppen

Aus Satz 5.10. folgt nicht nur die Existenz des invarianten Gitters, sondern auch die Tatsache, daß es nur endlich viele Raumgruppenklassen geben kann. Da als translative Komponente nur Vielfache von $\frac{1}{\text{ord}(\mathcal{G}/\mathcal{Z})}$ auftreten können, sind nur endlich viele Raumgruppenmatrizen möglich, also auch nur endlich viele inäquivalente Raumgruppen. Da die translativen Anteile der Raumgruppenoperationen durch die Gruppenrelationen verknüpft sind, reduziert sich die Zahl der zunächst als möglich erscheinenden Raumgruppenmatrizen sehr stark. Man kann aus solchen Relationen zwischen den Raumgruppenoperationen unter Heranziehung geometrischer Argumente die Raumgruppen synthetisch gewinnen. Das entspricht etwa den Verfahren von SCHOENFLIES, NIGGLI und G. HERMANN.

Der Satz 5.10. bietet aber noch einen weiteren Aspekt. Man kann diejenigen Raumgruppen als Ausgangspunkt nehmen, die als Lagekennstellenmatrix die Nullmatrix besitzen bzw. bei zentrierten Gittern noch zusätzlich die zentrierten Operationen. Dann beschreibt man diese Raumgruppe von einer in jeder Achsrichtung um $\text{ord}(\mathcal{G}/\mathcal{Z})$ vervielfachten Basis aus. Dann enthält die Raumgruppenmatrix der so aufgestellten Raumgruppen alle Lagekennstellenzeilen Γ beliebiger Raumgruppen der gleichen Kristallklasse. Das bedeutet, daß man sicher (bis auf Nullpunktsverschiebungen) alle Raumgruppenmatrizen durch Untergruppenbildung ausgehend von den sehr einfachen "Gittergruppen" finden kann. Dieser Weg soll im folgenden besprochen werden.

6.1. Zellengleiche klassengleiche Untergruppen

Zur Klassifikation von Untergruppenbeziehungen zwischen Raumgruppen wurden von C. HERMANN zwei Begriffe eingeführt. Man sagt: $\mathcal{U}$ ist zellengleiche Untergruppe von $\mathcal{G}$, wenn die Translationennormalteiler von $\mathcal{U}$ und $\mathcal{G}$ übereinstimmen. Der Übergang von $\mathcal{G}$ nach $\mathcal{U}$ erfolgt dann einfach dadurch, daß die Zeilen der Raumgruppenmatrix

von G , deren rotativer Anteil in H nicht auftritt gestrichen werden.

H heißt klassengleiche Untergruppe von G , wenn die Punktgruppenmatrizen von G und H übereinstimmen. Eine allgemeine Untergruppe ist weder zellengleich noch klassengleich, aber ist H Untergruppe von G , so kann man eine eindeutig bestimmte zellengleiche Zwischen-Untergruppe Z finden, die klassengleiche Obergruppe von H ist. Dazu muß man nur die Zeilen der Raumgruppenmatrix von G streichen, zu denen in H kein rotativer Anteil existiert. Die Kenntnis der zellengleichen und klassengleichen Untergruppen ist daher ausreichend, um den vollständigen Untergruppenverband einer Raumgruppe zu beschreiben.

6.2. Maximale Untergruppen

Eine weitere Reduktion der Untersuchung der Untergruppenbeziehungen kann dadurch erreicht werden, daß man nur solche Untergruppen H von G betrachtet, zu denen es keine Zwischengruppe Z : $H \subsetneq Z \subsetneq G$ gibt. Solche Untergruppen heißen maximale Untergruppen. Die Untersuchung der maximalen Untergruppen genügt deshalb, weil jeder Untergruppenverband einer Raumgruppe lokalendlich ist, d.h. ist $H \subsetneq G$ so existieren nur endlich viele Raumgruppen $H_1, \dots, H_n$ mit $H \subsetneq H_i \subsetneq G$. Man sieht dies sofort ein, wenn man die Gruppe G bzgl. der Basis von H darstellt und die endlich vielen Symmetrieelemente von G in die Elementarzelle einträgt. Man hat nur endlich viele Möglichkeiten, Symmetrieelemente auszulöschen und die Symmetrieelemente von H beizubehalten.

6.3. Untergruppendiagramme

Da äquivalente Gruppen insbesondere isomorph sind (Konjugation ist ein Isomorphismus), haben sie isomorphe Untergruppenverbände. Deshalb kann man jeder Raumgruppenklasse einen Untergruppenverband zuordnen. Solche Untergruppenverbände stellt man zweckmäßigerweise durch Graphen dar, deren Punkte Raumgruppen darstellen und deren Kanten maximale Untergruppenbeziehungen bedeuten. Um diese Graphen möglichst zu reduzieren, trägt man an den Punkten nur die Symbole der Raumgruppenklasse ein. Tritt im Zuge des Symmetrieabbaus eine Raumgruppenklasse wiederholt als Untergruppenklasse auf, so wird der Graph dort nicht fortgesetzt, da man ihn durch Sprung an die Stelle, wo sie zum erstenmal aufgetreten ist jederzeit rekonstruieren kann. Die so erzeugten Bilder der maximalen Untergruppenzusammenhänge sollen Untergruppendiagramme genannt werden.

6.4. Zellengleiche Untergruppen

Betrachtet man nur die zellengleichen Untergruppen, so erkennt man aus dem oben angegebenen Ableitungsverfahren sofort, daß das zugehörige Untergruppendiagramm isomorph ist zum Graphen des Untergruppenverbandes der zugehörigen Faktorgruppe G/H . Die zellengleichen Untergruppen stellen also kein Problem dar. Im folgenden sollen daher nur noch klassengleiche Untergruppenbeziehungen betrachtet werden.

6.5. Gittergruppen

Die 14 BRAVAIS-Gitter sind spezielle reguläre Punktsysteme. Ihre Punktsymmetriegruppen sind die sieben Holoedrien und ihre Translationengruppen die BRAVAIS-Gitter. Daher werden die zugehörigen Raumgruppen erzeugt aus den Punktgruppenoperationen verknüpft mit den ganzzahligen Translationen und Zentrierungen. In der Sprache der abstrak-

ten Gruppentheorie handelt es sich um semidirekte Produkte aus Punktgruppen und Translationsgruppen: $L_3 = 507$. Ihre Raumgruppenmatrizen haben eine sehr einfache Form: die Punktgruppenmatrix besteht aus den Symmetrieoperationen einer Holoedrie und die Lauekennstellenmatrix ist für primitive Gruppen die Nullmatrix; für zentrierte Gruppen erzeugen die jeweiligen Zentrierungen weitere Lauekennstellenmatrizen, in denen jede Zeile aus dem Koordinaten-tripel der Zentrierung besteht. Als Gittergruppen sollen nun die eben beschriebenen Raumgruppen und ihre zellengleichen Untergruppen bezeichnet werden.

Die zuerst beschriebenen 14 Gittergruppen haben die HERMANN-MAGUIN-Symbole:

$P\bar{1}$

P_m^2, C_m^2

$P_m^2 \frac{2}{m} \frac{2}{m}, C_m^2 \frac{2}{m} \frac{2}{m}, I_m^2 \frac{2}{m} \frac{2}{m}, F_m^2 \frac{2}{m} \frac{2}{m}$

$P\frac{3}{m}^2$

$P_m^4 \frac{2}{m} \frac{2}{m}, I_m^4 \frac{2}{m} \frac{2}{m}$

$P_m^6 \frac{2}{m} \frac{2}{m}$

$P_m^4 \frac{3}{m}^2, I_m^4 \frac{3}{m}^2, F_m^4 \frac{3}{m}^2$

Als zellengleiche Untergruppen gewinnt man daraus

$P1$

$P2, Pm, C2, Cm$

$P222, Pmm2, C222, Cmm2, Amm2,$

$I222, Immm2, F222, Fmmm2$

$P32, P3m, P\bar{3}, P3$

$P4mm, P422, P\bar{4}2m, P4m2, P\frac{4}{m}, P\bar{4}, P4$

$I4mm, I422, I\bar{4}2m, I\bar{4}m2, I\frac{4}{m}, I\bar{4}, I4$

$P6mm, P622, P\bar{6}2m, P\bar{6}m2, P\frac{6}{m}, P\bar{6}, P6$

$P3m1, P31m, P321, P312, P\bar{3}1\frac{2}{m}, P\bar{3}1\frac{2}{m}, P\bar{3}11, P311$

$P432, P\bar{4}3m, P\frac{2}{m}\bar{3}, P23, I432, I\bar{4}3m, I\frac{2}{m}, I23, F432, F\bar{4}3m, F\frac{2}{m}\bar{3}, F23$

Dies sind insgesamt 73 Raumgruppenklassen. Sie sind Symmetriegruppen der BRAVAISschen Strukturen, d.h. derjenigen regulären Punktsysteme, die aus den BRAVAIS-Gittern dadurch gewonnen werden, indem man jeden Gitterpunkt durch eine von der allgemeinen Punktlage der Punktsymmetriegruppe erzeugte Punktkonfiguration ersetzt. Diese BRAVAISschen Strukturen sind der historische Ausgangspunkt für die allgemeine Ableitung der regulären Punktsysteme.

6.6. Raumgruppen als klassenleiche Untergruppen der P-Gittergruppen

Aus dem Beweis des Satzes 5.10. folgt nun, daß man für eine beliebige Raumgruppe $\mathcal{U}$ nur die zugehörige klassenleiche P-Gittergruppe betrachten muß und die P-Gittergruppe bzgl. einer Basis zu beschreiben hat, deren Basisvektoren die mit $\text{ord}(\mathcal{U}/\mathcal{U})$ multiplizierten Basisvektoren der Ausgangsbasis sind. Dann ist $\mathcal{U}$ jedenfalls klassenleiche Untergruppe der P-Gittergruppe. Wenn der Lokalendlichkeit des Untergruppenverbands muß man $\mathcal{U}$ auch finden, wenn man die maximalen klassenleichen Untergruppen der Gittergruppen aufsucht und wiederum deren maximale klassenleiche Untergruppen usw. Sucht man nur die verschiedenen Raumgruppenklassen, so muß das Verfahren endlich sein, da es nur endlich viele ver-

schiedene Raumgruppenklassen gibt. Dieses Verfahren soll im folgenden zur Ableitung der Raumgruppenklassen verwendet werden. Dazu ist ein Verfahren zur Auffindung aller maximalen klassen-
gleichen Untergruppen anzugeben.

6.7. Untergruppentransformationen

Raumgruppen sollen stets von ihrer symmetriebezogenen Basis aus durch eine Raumgruppenmatrix beschrieben werden.

Ist $\mathcal{U}$ eine klassengleiche Untergruppe von $\mathcal{G}$, so ist das Translationsgitter von $\mathcal{U}$ ein Teilgitter von Γ ($\mathcal{T}_{\mathcal{G}}$). Also gibt es stets eine ganzzahlige Matrix T , welche die Basistransformation von der symmetriebezogenen Basis von $\mathcal{G}$ auf die symmetriebezogene Basis von $\mathcal{U}$ beschreibt. Eindeutigkeit kann für diese Matrix nur bis auf die Symmetrien, die das Koordinatenkreuz zuläßt, erreicht werden. Die Matrix T muß in der Systemgruppe $\mathcal{M}$ von $\mathcal{G}$ und $\mathcal{U}$ enthalten sein, da die Symmetriebedingungen der Basen erhalten bleiben. Die Menge dieser Matrizen T bildet bei Untergruppenbeziehungen zwischen primitiven Raumgruppen eine Halbgruppe $\mathcal{T}$, die in $\mathcal{M}$ enthalten ist. Welche Matrizen für eine Kristallklasse in Frage kommen, hängt vom Kristallsystem, den Kennstellenvektoren der erzeugenden Symmetrieeoperationen und den BRAVAIS-Gittern von Ober- und Untergruppe ab. Eine Besonderheit tritt für das rhomboedrische und hexagonale Kristallsystem auf, da jedes rhomboedrische Gitter ein hexagonales Teilgitter besitzt und umgekehrt jedes hexagonale Gitter ein rhomboedrisches Gitter enthält. Deshalb treten in Raumgruppen mit rhomboedrischer Kristallklasse sowohl Gruppen mit hexagonalem als auch mit rhomboedrischem Translationsgitter auf. Das führt dazu, daß man die beiden Kristallsysteme zu einer Kristallfamilie zusammenfaßt. Für die anderen Kristallsysteme stimmt der Begriff der Kristallfamilie mit dem des

Kristallsystems überein. (Erst in der Kristallographie in höheren Dimensionen spielt der Begriff der Kristallfamilie eine gewichtigere Rolle.)

5.3. Primtransformationen

Ist $\mathcal{U}$ klassenleiche Untergruppe von $\mathcal{G}$ und $\mathcal{V}$ Zwischengruppe $\mathcal{U} \subset \mathcal{V} \subset \mathcal{G}$, so läßt sich die Untergruppentransformation $T(\mathcal{G}, \mathcal{U})$ faktorisieren:

$$T(\mathcal{G}, \mathcal{U}) = T(\mathcal{G}, \mathcal{V}) \circ T(\mathcal{V}, \mathcal{U}),$$

wobei $T(\mathcal{G}, \mathcal{U})$, $T(\mathcal{G}, \mathcal{V})$ und $T(\mathcal{V}, \mathcal{U})$ derselben Transformationshalbgruppe $\mathcal{T}$ angehören müssen.

Ist keine solche Faktorisierung möglich, so ist die Untergruppe maximal. Solche Transformationen sollen Primtransformationen genannt werden. Die Aufgabe, die maximalen klassenleichen Untergruppen aufzufinden, ist damit auf das Aufsuchen der Primtransformationen reduziert.

5.3. Primtransformationen zwischen zentrierten Gittern

Sind die Gruppe $\mathcal{G}$ und die klassenleiche Untergruppe $\mathcal{U}$ beide primitiv, so ist jede ganzzahlige Transformation $T \in \mathcal{T}$ Untergruppentransformation, und jede Primtransformation aus $\mathcal{T}$ führt auf eine maximale zelleneleiche Untergruppe. Sind jedoch $\mathcal{G}$ und/oder $\mathcal{U}$ zentriert, so ist eine Transformation $T \in \mathcal{T}$ genau dann Untergruppentransformation, wenn die Transformationsmatrizen der zugehörigen primitiven Basen ganzzahlig sind. Dazu betrachtet man für alle Zentriersystemen $\mathcal{Z}$, normierte Transformationen $T_{\mathcal{Z}}$ von der zentrierten Aufstellung auf die primitive Aufstellung.

Tabelle der Transformationen von zentrierten auf primitive Gitterbasen

$$T_C = \begin{pmatrix} 1/2 & -1/2 & 0 \\ 1/2 & 1/2 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad T_I = \begin{pmatrix} -1/2 & 1/2 & 1/2 \\ 1/2 & -1/2 & 1/2 \\ 1/2 & 1/2 & -1/2 \end{pmatrix}$$

$$T_F = \begin{pmatrix} 0 & 1/2 & 1/2 \\ 1/2 & 0 & 1/2 \\ 1/2 & 1/2 & 0 \end{pmatrix} \quad T_A = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1/2 & -1/2 \\ 0 & 1/2 & 1/2 \end{pmatrix}$$

$$T_R = \begin{pmatrix} 2/3 & -1/3 & -1/3 \\ 1/3 & 1/3 & -2/3 \\ 1/3 & 1/3 & 1/3 \end{pmatrix} \quad T_P = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

Ist $T \in \mathbb{T}$ die Transformationsmatrix der symmetriebezogenen Basen

A_{Z_1}, B_{Z_2}

$$B_{Z_2} = A_{Z_1} T$$

So ist

$$B_{P_2} = B_{Z_2} T_{Z_2}^{-1} \\ A_{P_1} = A_{Z_1} T_{Z_1}^{-1}$$

also

$$B_{P_2} T_{Z_2}^{-1} = A_{P_1} T_{Z_1}^{-1} T$$

d.h.

$$B_{P_2} = A_{P_1} T_{Z_1}^{-1} T T_{Z_2}$$

Damit also $T \in \mathcal{T}$ eine Untergruppentransformation zwischen einer Z_1 -zentrierten Obergruppe und einer Z_2 -zentrierten Untergruppe darstellt, muß $T_{Z_1}^{-1} T T_{Z_2}$ eine ganzzahlige Matrix sein. Die Menge der möglichen Untergruppentransformationen wird dadurch verkleinert, und dementsprechend treten auch andere Primtransformationen auf.

6.10. Untergruppentransformationen auf Raumgruppenmatrizen

Ist $T_0 \in \mathcal{T}$ eine Untergruppentransformation und (R, T) eine Raumgruppenoperation von $\mathcal{U}$, so bedeutet die Transformation zunächst eine Beschreibung von $\mathcal{U}$ bzgl. der Basis von $\mathcal{V}$

$$\begin{aligned} \mathcal{B} &= \mathcal{A} T_0 \\ \Rightarrow \tilde{\mathcal{C}} &= \mathcal{A} \tilde{X} = \mathcal{A} R X + \mathcal{A} T \\ &= \mathcal{A} (R, T) X \\ &= (R, T) \mathcal{C} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \tilde{\mathcal{C}} &= \mathcal{B} T_0^{-1} \tilde{X} = \mathcal{B} T_0^{-1} (R, T) X \\ \tilde{X} &= T_0^{-1} X \\ X' &= T_0^{-1} X \end{aligned}$$

$$\tilde{\mathcal{C}} = \mathcal{B} \tilde{X}' = \mathcal{B} (T_0^{-1}, 0) (R, T) (T_0, 0) X$$

Also ist

$$(R, T)' = (T_0^{-1} R T_0, T_0^{-1} T)$$

d.h. der rotative Anteil von R wird mit T_0 konjugiert, während der translative Anteil mit T_0^{-1} multipliziert wird.

6.11. Äquivalente Untergruppen

Ziel der Überlegungen ist die Ableitung aller Raumgruppenklassen aus ihren klassengleichen Untergruppenbeziehungen. Deshalb spielen in diesem Zusammenhang diejenigen Untergruppenbeziehungen eine untergeordnete Rolle, die nur auf äquivalente Untergruppen führen. Die Ausschaltung der äquivalenten Untergruppen bringt eine bedeutende Vereinfachung des Verfahrens mit sich, da auf diese Weise die Zahl der Primtransformationen erheblich reduziert werden kann. $P\bar{I}$ z. B. besitzt keine inäquivalenten klassengleichen Untergruppen, jedoch unendlich viele maximale äquivalente Untergruppen.

Um festzustellen, ob eine Untergruppe äquivalent ist zur Obergruppe, muß man nur das Transformationsverhalten der Kennanteilvektoren beobachten und zwar nur für die Symmetrieeoperationen, die im HERMANN-MAUGUIN-Symbol als Erzeugende ausgezeichnet sind. Ändert sich bei einer Transformation keiner der Kennanteilvektoren, so sind Ober- und Untergruppe äquivalent.

6.12. Dezentrierungen

Bei der Ableitung der Raumgruppenklassen zeigt sich, daß die Primtransformationen zwischen zentrierten Raumgruppen zumeist Dezentrierungen sind. Bei Dezentrierungen entstehen keine neuen Typen von Symmetrieelementen - es fällt nur ein Teil von ihnen davon weg. Zur Behandlung der Dezentrierungen muß man daher alle Symmetrieelemente kennen, die als Erzeugende in einer Blickrichtung einer Untergruppe vorkommen können - nicht nur die im HERMANN-MAUGUIN-Symbol aufgeführten. Man kann zu diesem Zweck ein vervollständigtes HERMANN-MAUGUIN-Symbol schreiben, indem man zu jedem in einer Blickrichtung möglichen erzeugenden Element das durch die Zentrierung zusätzlich entstehende hinzufügt und solche Symbolgruppen zusammenklammert. Diese vervollständigten Symbole sind in der folgenden Tabelle zusammengestellt.

Dabei sind auch die durch diagonale Lage der Symmetrieelemente
zusätzlich entstehenden Symbole aufgeführt:

Tabelle

monoklin:

$$C \frac{(2, 2_1)}{\begin{pmatrix} (m, a) \\ (c, n) \end{pmatrix}}$$

orthorhombisch:

$$C \frac{(2, 2_1)}{\begin{pmatrix} (m, b) \\ (c, n) \end{pmatrix}} \frac{(2, 2_1)}{\begin{pmatrix} (m, a) \\ (c, n) \end{pmatrix}} \frac{(2) (2_1)}{\begin{pmatrix} (m, n) \\ (a, b) \end{pmatrix}}$$

$$A \frac{(2) (2_1)}{\begin{pmatrix} (m, n) \\ (b, c) \end{pmatrix}} \frac{(2, 2_1)}{\begin{pmatrix} (m, c) \\ (a, n) \end{pmatrix}} (2, 2_1)$$

$$I \frac{(2, 2_1)}{\begin{pmatrix} (m, n) \\ (b, c) \end{pmatrix}} \frac{(2, 2_1)}{\begin{pmatrix} (m, n) \\ (a, c) \end{pmatrix}} \frac{(2, 2_1)}{\begin{pmatrix} (m, n) \\ (a, b) \end{pmatrix}}$$

$$F \frac{(2, 2_1)}{\begin{pmatrix} (m, b, c, n) \\ (d) \end{pmatrix}} \frac{(2, 2_1)}{\begin{pmatrix} (m, a, c, n) \\ (d) \end{pmatrix}} \frac{(2, 2_1)}{\begin{pmatrix} (m, a, b, n) \\ (d) \end{pmatrix}}$$

tetragonal:

$$P \frac{(2, 2_1)}{\begin{pmatrix} (m, b) \\ (c, n) \end{pmatrix}}$$

$$I \frac{(4, 4_2) (4_1, 4_3) (\bar{4})}{\begin{pmatrix} (m, n) \\ (a, b) \end{pmatrix}} \frac{(2, 2_1)}{\begin{pmatrix} (m, n) \\ (c, b) \end{pmatrix}} \frac{(2, 2_1)}{\begin{pmatrix} (m, b, n, c) \\ (d) \end{pmatrix}}$$

rhomboedrisch:

$$P \frac{(\bar{3}, 3, 3_1, 3_2) \quad (2, 2_1)}{(3, 3_1, 3_2) \quad \frac{(m, b)}{(c, n)}}$$

hexagonal:

$$P \frac{(2, 2_1) \quad (2, 2_1)}{\frac{(m, b)}{(c, n)} \quad \frac{(m, b)}{(c, n)}}$$

kubisch:

$$P \frac{(2, 2_1)}{\frac{(m, b)}{(n, c)}}$$

$$\begin{array}{l} (4, 4_2, 2, 2_1) \quad (2, 2_1) \\ (4_1, 4_3, 2, 2_1) \\ (\bar{4}, 2, 2_1) \\ \hline (m, n) \\ (a, b, c) \end{array}$$

$$\begin{array}{l} (\bar{3}, 3, 3_1, 3_2) \quad (2, 2_1) \\ (3, 3_1, 3_2) \quad \frac{(m, n, b, c)}{(d)} \end{array}$$

$$\begin{array}{l} (4, 4_2, 2, 2_1) \quad (2, 2_1) \\ (4_1, 4_3, 2, 2_1) \quad (\bar{4}) \\ \hline (m, n, b, c, a) \\ (d) \end{array}$$

$$\begin{array}{l} (\bar{3}, 3, 3_1, 3_2) \quad (2, 2_1) \\ (3, 3_1, 3_2) \quad \frac{(m, n)}{(c, b)} \end{array}$$

6.13. Adjazenzmatrizen

Die Untergruppenbeziehungen können gemäß 6.3. in der Form von Graphen dargestellt werden. Dabei sollen zwei Raumgruppensymbole von G_j und G_k mit einem Pfeil von G_j nach G_k verbunden werden, wenn G_j maximale klassengleiche Untergruppen von G_k ist. Diese Diagramme werden im

orthorhombischen System aufgrund der Vielzahl der Untergruppenbeziehungen sehr unübersichtlich. In dieser Arbeit sollen daher nur die Adjazenzmatrizen der Untergruppendiagramme angegeben werden, aus denen man sofort den zugehörigen Graphen konstruieren kann. Eine Adjazenzmatrix im hier verwendeten Sinne entsteht, wenn man alle Raumgruppensymbole einer Kristallklasse an die Ränder eines quadratischen Schemas schreibt und in der i -ten Zeile und j -ten Spalte eine Transformation einträgt, wenn die j -te Raumgruppe maximale klassengleiche Untergruppe der i -ten Gruppe unter der eingetragenen Transformation ist.

7. Ableitung der Raumgruppenklassen aus ihren Untergruppenbeziehungen

Im folgenden Abschnitt soll für jede Kristallfamilie die Halbgruppe $\mathcal{T}$ untersucht und ihre Primtransformationen für inäquivalente Untergruppen abgeleitet werden. Die Transformationen werden schließlich auf Operationen auf den HERMANN-AUGUIN-Symbolen reduziert.

7.1. Triklone Kristallfamilie

Die Systemgruppe des triklinen Systems $\mathcal{O}L$ ist OL^+ . Es gibt keine symmetrisch ausgezeichnete Basis und daher nur das BRAVAIS-Gitter P . Die Halbgruppe $\mathcal{a}\mathcal{T}$ besteht daher aus allen ganzzahligen Matrizen $T \in OL^+$. Es wäre eine recht aufwendige Untersuchung, die Primtransformationen von $\mathcal{a}\mathcal{T}$ zu ermitteln. Für die Ableitung der Raumgruppenklassen ist dies jedoch nicht erforderlich, da es nur zwei Kristallklassen im triklinen System gibt: es sind die Raumgruppen zu den Punktgruppen 1 und $\bar{1}$. Der Kennanteilvektor der Operation

$$(1, T) \quad \text{ist} \quad T_K = T,$$

da der ganze Raum unter 1 festbleibt.

Der Kennanteilvektor von

$$(\bar{1}, T) \quad \text{ist} \quad T_K = 0,$$

da nur der Inversionspunkt in Ruhe bleibt. Da nur das BRAVAIS-Gitter aP existiert, ist T_K von 1 stets der Nullvektor, also gibt es nur eine Raumgruppenklasse $P1$.

Ebenso existiert nur eine Raumgruppenklasse $P\bar{1}$, da bei allen Untergruppentransformationen der Vektor $T_K = 0$ invariant ist.

Für beide Raumgruppen gibt es aber unendlich viele maximale äquivalente Untergruppen, etwa diejenigen, die man durch die Transformationen

$$\begin{pmatrix} m & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

mit einer Primzahl m

findet.

7.2. Monokline Kristallfamilie

a) Monokline Transformationshalbgruppe $m\tau$

Die Systemgruppe des monoklinen Systems m $\mathcal{M}$ wird erzeugt von allen Drehungen des Raumes und allen Matrizen

$$\begin{pmatrix} a & 0 & b \\ 0 & c & 0 \\ d & 0 & e \end{pmatrix}$$

mit $ace - bcd > 0$

Im monoklinen System gibt es zwei BRAVAIS-Gitter mP und mC . Daher gibt es neben der monoklinen Transformationshalbgruppe $m\tau$, die die Untergruppentransformationen zwischen monoklinen P -Raumgruppen beschreibt und daher auch mit $m\tau(P,P)$ bezeichnet werden soll noch drei andere Teilmengen von $m\tau$, welche die (P,C) , (C,C) und (C,P) Untergruppentransformationen enthalten. Diese Teilmengen sollen entsprechend mit $m\tau(P,C)$, $m\tau(C,C)$ und $m\tau(C,P)$ bezeichnet werden.

Zunächst soll $m\tau(P,P)$ untersucht werden. Die Matrizen von m $\mathcal{M}$, die in $m\tau$ liegen, unterliegen zwei Einschränkungen

- (1) die symmetriebegabte Richtung muß erhalten bleiben und senkrecht auf den beiden anderen Richtungen stehen
- (2) die Matrizen müssen ganzzahlig sein.

Da man bei der Ableitung der Raumgruppenklassen auf äquivalente Untergruppenbeziehungen weitgehend verzichten möchte, kommen noch Einschränkungen hinzu, die abhängig sind von der jeweils betrachteten Kristallklasse.

Aus den Forderungen (1) und (2) erhält man sofort die allgemeine Form der Matrizen in $m \subset (P, P)$:

$$\begin{pmatrix} a & 0 & b \\ 0 & c & 0 \\ d & 0 & e \end{pmatrix} \quad \begin{array}{l} a, b, c, d, e \in \mathbb{Z} \\ ace - bcd \neq 1 \end{array}$$

[$ace - bcd = 1$ wäre nur eine Basistransformation].
 $m \subset (P, C)$ verlangt zusätzlich die Bedingung:

$$\begin{pmatrix} a & 0 & b \\ 0 & c & 0 \\ d & 0 & e \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1/2 & -1/2 & 0 \\ 1/2 & 1/2 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

muß ganzzahlig sein, also

$$\begin{pmatrix} a/2 & -a/2 & b \\ c/2 & c/2 & 0 \\ d/2 & -d/2 & e \end{pmatrix} \quad \text{ganzzahlig.}$$

Die Matrizen von $m \subset (P, C)$ haben also die Form

$$\begin{pmatrix} 2a' & 0 & b \\ 0 & 2c' & 0 \\ 2d' & 0 & e \end{pmatrix}$$

Für $m \subset (C, C)$ muß gelten

$$\begin{pmatrix} 1 & 1 & 0 \\ -1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a & 0 & b \\ 0 & c & 0 \\ d & 0 & e \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1/2 & -1/2 & 0 \\ 1/2 & 1/2 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

$$\underbrace{\hspace{10em}}_{=}$$

$$\begin{pmatrix} a/2 & -a/2 & b \\ c/2 & c/2 & 0 \\ d/2 & -d/2 & e \end{pmatrix}$$

$$= \begin{pmatrix} \frac{c+a}{2} & \frac{c-a}{2} & b \\ \frac{c-a}{2} & \frac{c+a}{2} & -b \\ d/2 & -d/2 & e \end{pmatrix} \quad \text{ganzzahlig.}$$

Man erhält zwei Matrizentypen als Lösung

$$\begin{pmatrix} 2a' & 0 & b \\ 0 & 2c' & 0 \\ 2d' & 0 & e \end{pmatrix} \quad \text{und} \quad \begin{pmatrix} 2a'+1 & 0 & b \\ 0 & 2c'+1 & 0 \\ 2d' & 0 & e \end{pmatrix}$$

Schließlich erfordert $m \in \mathbb{Z}(C, P)$:

$$\begin{pmatrix} 1 & 1 & 0 \\ -1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a & 0 & b \\ 0 & c & 0 \\ d & 0 & e \end{pmatrix} \quad \text{ganzzahlig,}$$

was stets erfüllt ist.

(b) Primtransformationen

Zuerst soll die Faktorisiertbarkeit in $\mathbb{Z}(P, Q)$ untersucht werden.

Es gilt stets

$$\begin{pmatrix} p & 0 & q \\ 0 & r & 0 \\ s & 0 & t \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} p & 0 & q \\ 0 & 1 & 0 \\ s & 0 & t \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & r & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

Ist r eine Primzahl, so ist der zweite Faktor unzerlegbar. Diese Transformation soll mit rb bezeichnet werden, ist $r \neq 2$, so schreibt man einfach b . Besitzen p und s einen gemeinsamen Faktor $p=t'p'$, $s=t's'$, so ist stets die Faktorisierung

$$\begin{pmatrix} p & 0 & q \\ 0 & 1 & 0 \\ s & 0 & t \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} m' & 0 & q' \\ 0 & 1 & 0 \\ s' & 0 & t' \end{pmatrix} \quad \begin{pmatrix} t' & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad \text{möglich.}$$

Ist t' prim, so ist der zweite Faktor unzerlegbar und soll durch $t'a$ bezeichnet werden.

Für die weitere Untersuchung kann daher angenommen werden, daß p und s teilerfremd sind, d.h. es gibt zu (p,s) keinen kürzeren Gittervektor (p',s') , so daß $(p,s) = t'(p',s')$ ist.

Ist $\mathcal{A} = (\mathcal{U}_1, \mathcal{U}_2, \mathcal{U}_3)$ die Gitterbasis, so zerfällt die Menge der Gitterpunkte in der (x, y, z) -Ebene in Teilmengen, die auf Gittergeraden parallel zu

$$\mathcal{L}_1 = \mathcal{A} \begin{pmatrix} p \\ 0 \\ s \end{pmatrix}$$

liegen. $\mathcal{L}_1$ ist die Translationsperiode auf diesen Geraden. Zur Nullpunktsgerade gibt es zwei Nachbargeraden; auf einer dieser Geraden wählt man einen Gitterpunkt als Basisvektor $\mathcal{U}'_3$ so, daß ein rechtshändiges Koordinatensystem $\mathcal{A}'_1 = (\mathcal{U}'_1, \mathcal{U}'_2, \mathcal{U}'_3)$ entsteht. Nach Konstruktion liegen weder auf Kanten noch Flächen noch im Inneren dieser Elementarzelle Gitterpunkte. Also ist die Basis $\mathcal{A}'_1$ eine Basis des Ausgangsgitters und die Basistransformation hat die Determinante 1. Der Vektor $\mathcal{U}'_3$ liegt nun ebenfalls auf einer der durch $\mathcal{L}_1$ definierten Gittergeraden. Man multipliziert deshalb den Vektor $\mathcal{U}'_3$ mit einem ganzzahligen Faktor f , so daß $f\mathcal{U}'_3$ und $\mathcal{U}'_3$ auf einer der $\mathcal{L}_1$ -Gittergeraden liegt. Im dritten Schritt wird nur noch eine Scherung längs der Gittergeraden vorgenommen, wobei sich das Volumen der Elementarzelle nicht ändert. Die gesamte Volumenänderung findet also bei der Vervielfachung des Vektors $\mathcal{U}'_3$ statt; deshalb ist

$$f = pt - sq = \det \begin{pmatrix} p & 0 & q \\ 0 & 1 & 0 \\ s & 0 & t \end{pmatrix}$$

Es ist also stets eine Faktorisierung der Form

$$\begin{pmatrix} p & 0 & q \\ 0 & 1 & 0 \\ s & 0 & t \end{pmatrix} = \underbrace{\begin{pmatrix} p & 0 & x \\ 0 & 1 & 0 \\ s & 0 & y \end{pmatrix}}_{\det=1} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & pt-sq \end{pmatrix} \underbrace{\begin{pmatrix} 1 & 0 & qy-tx \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}}_{\det=1}$$

möglich. Die mittlere Matrix ist genau dann nicht weiter faktorisierbar, wenn $u = pt - sq$ prim ist. Die Transformation soll mit uc bezeichnet werden.

Resultat: die Primtransformationen in $m(P,P)$ sind pa, qb, rc .

In $m \subset (P,C)$ sind die Transformationsmatrizen von der Form

$$\begin{pmatrix} 2p & 0 & q \\ 0 & 2r & 0 \\ 2d & 0 & e \end{pmatrix}$$

die sich stets in der Form

$$T = \begin{pmatrix} 2p & 0 & q \\ 0 & 2r & 0 \\ 2d & 0 & e \end{pmatrix} = \underbrace{\begin{pmatrix} p & 0 & q \\ 0 & r & 0 \\ d & 0 & e \end{pmatrix}}_{T_1} \underbrace{\begin{pmatrix} 2 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}}_{T_2}$$

zerlegen läßt. Der erste Faktor T_1 ist eine (P,P) -Transformation und muß die Determinante 1 haben, wenn T eine Primtransformation sein soll. T_2 läßt sich dann nur noch zerlegen in

$$\begin{pmatrix} 2 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

aber keiner der Faktoren ist in $m \subset (P,C)$ enthalten. Also ist die einzige Primtransformation in $m \subset (P,C)$ die Matrix

$$\begin{pmatrix} 2 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

die abkürzend mit ab bezeichnet wird.

$m \subset (C,P)$ stimmt mit $m \subset (P,P)$ überein. Es gilt jedoch eine zusätzliche Eigenschaft: die Einheitsmatrix beschreibt eine echte Untergruppentransformation, da bei der Dezentrierung die Elementarzelle erhalten bleibt. Da die Einheitsmatrix stets als Faktor abgetrennt werden kann, ist sie die einzige Primtransformation für $m \subset (C,P)$. Für $m \subset (C,C)$ ergaben sich zwei Matrizentypen

$$T_1 = \begin{pmatrix} 2p & 0 & q \\ 0 & 2r & 0 \\ 2s & 0 & t \end{pmatrix} \quad \text{und} \quad T_2 = \begin{pmatrix} 2p+1 & 0 & q \\ 0 & 2r+1 & 0 \\ 2s & 0 & t \end{pmatrix}$$

Die Matrix T_1 läßt sich stets zerlegen:

$$T_1 = E \begin{pmatrix} p & 0 & q \\ 0 & r & 0 \\ s & 0 & t \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 2 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

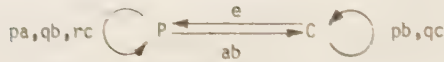
Dabei ist der erste Faktor eine (C,P) -, der zweite eine (P,P) - und der dritte Faktor eine (P,C) -Transformation. Also resultieren keine Primtransformationen.

Die Matrix T_2 läßt sich zerlegen in

$$\begin{pmatrix} 2p+1 & 0 & q \\ 0 & 1 & 0 \\ 2s & 0 & t \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 2r+1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

Ist $r \neq 0$, so muß die Determinante des ersten Faktors gleich eins sein, sonst läge echte Zerlegbarkeit vor. Man erhält in Falle, daß $2r+1$ prim ist die Transformation $(2r+1)b$. Eine Zerlegung wie oben ist nicht möglich, da $(2r+1)b$ keine (P,C) -Transformation ist. Ist $r = 0$, so läßt sich T_2 wie in $m \subset (P,P)$ faktorisieren, und man erhält die Transformation $[(2a+1)t-2as]c$, falls die Determinante prim ist.

Die möglichen Primtransformationen lassen sich im folgenden Graphen zusammenfassen:

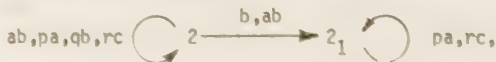


(c) Reduktion der Primtransformationen

Im monoklinen System gibt es die Punktgruppen 2 , m und $2/m$. Als Erzeugende treten also die Operationen 2_y und m_y auf. Die zugehörigen Raumgruppenoperationen $(2,T)$ und (m,T) haben Kennstellenvektoren T_{K2} und T_{Km} .

Wegen $(2,T)^2 = (E, 2T_{K2})$ hat T_{K2} die Form $T_{K2} = (0,t,0)$ und $(0,2t,0)$ muß Gittervektor sein. Da nur die BRAVAIS-Gitter P und C vorhanden sind, muß $2t$ ganzzahlig sein, also sind nur die Werte $t=0$ und $t=1/2$ möglich. Unter einigen der o.a. Primtransformationen ist T_{K2} invariant, nämlich für pa und rc . Für qb geht T_{K2} über in die Schar $\{(0, \frac{t+n}{q}, 0) / 0 \leq n \leq q-1\}$. Da t nur Werte 0 und $1/2$ annehmen kann, kommt nur $q=2$ für inäquivalente Untergruppen in Frage.

Für das Transformationsverhalten der 2-zähligen Achse kann man den folgenden Graphen zeichnen:



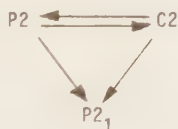
Zur Ableitung der Raumgruppen zur Kristallklasse 2 erhält man den folgenden reduzierten Graphen:



Die Ableitung der Raumgruppen der Kristallklasse 2 erfolgt nun in der Form:

	b	ab	e	
P2	[P2]	P2 ₁	C(2,2 ₁)	-
P2 ₁	-	-	-	-
C(2,2 ₁)	-	-	P2, P2 ₁	C(2,2 ₁) = C2

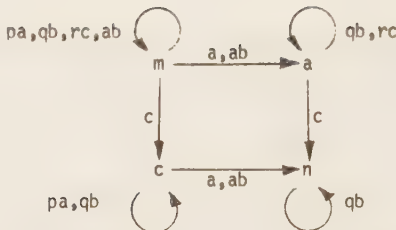
Das Untergruppendiagramm hat demgemäß die Gestalt:



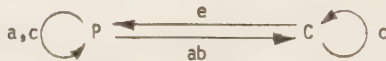
Der Kennstellenvektor T_{Km} hat die Form

$$T_{Km} = (t^1 \ 0 \ t^3)$$

und $2T_{Km}$ ist Gittervektor. Also können auch hier nur Kennstellen $t^i = 0$ oder $t^i = 1/2$ auftreten. T_{Km} ist invariant unter den Transformationen qb . Von den restlichen Transformationen sind nur diejenigen für inäquivalente Untergruppen von Interesse, bei denen eine Kennstelle 0 in $1/2$ transformiert wird: a, c, ab . Also erhält man für m die Transformationsbezeichnungen:



Für die Kristallklasse m ergibt sich demgemäß der reduzierte Graph:



Die Ableitung der Untergruppenklassen ergibt sich daraufhin im folgenden Schema:

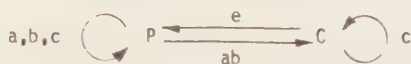
	a	c	ab	e	
Pm	$Pa \neq Pc$	Pc	$C(m, a)$	-	$C(m, a) = Cm$
Pc	$Pn(Pc)$	-	$C(c, n)$	-	$C(c, n) = Cc$
$C(m, a)$	-	$C(c, n)$	-	$Pm, Pa(Pc)$	
$C(c, n)$	-	-	-	$Pc, Pn(Pc)$	

Das Untergruppendiagramm nimmt die folgende Form an:



Für die Kristallklasse $2/m$ ändert sich nur der reduzierte Graph insofern als die reduzierten Transformationen der beiden Er-

zeugenden zugelassen werden müssen, also

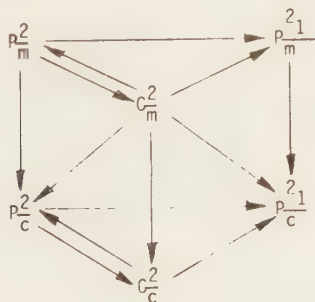


Also ergibt sich folgendes Ableitungsschema:

	a	b	c	ab	e
p_m^2	$p_a^2 (p_c^2)$	p_m^2	p_c^2	$\frac{(2,2_1)}{C(m,a)}$	-
p_c^2	$p_n^2 (p_c^2)$	p_c^2	-	$\frac{(2,2_1)}{C(c,n)}$	-
$p_m^{2_1}$	$p_a^{2_1} (p_c^{2_1})$	-	$p_c^{2_1}$	-	-
$p_c^{2_1}$	$p_n^{2_1} (p_c^{2_1})$	-	-	-	-
$\frac{(2,2_1)}{C(m,a)}$	-	-	$\frac{(2,2_1)}{C(c,n)}$	-	$p_m^2, p_m^{2_1}, p_a^2 (p_c^2), p_a^{2_1} (p_c^{2_1})$
$\frac{(2,2_1)}{C(c,n)}$	-	-	-	-	$p_c^2, p_n^2 (p_c^2), p_c^{2_1}, p_n^{2_1} (p_c^{2_1})$

$$\frac{(2,2_1)}{C(m,a)} = C_m^2, \quad \frac{(2,2_1)}{C(c,n)} = C_c^2$$

Das Untergruppendiagramm ist also:



7.3. Orthorhombische Kristallfamilie

(a) Orthorhombische Transformationshalbgruppe OT

Die orthorhombische Systemgruppe wird außer von der Drehgruppe durch die Matrizen

$$\begin{pmatrix} p & 0 & 0 \\ 0 & q & 0 \\ 0 & 0 & r \end{pmatrix} \quad pqr > 0 \quad \text{erzeugt.}$$

Es gibt die BRAVAIS-Gitter oP , oC , oI und oF . Für die Kristallklasse von $mm2$ muß auch oA betrachtet werden. Deshalb müssen neben $oT(P,P)$ auch die Teilmengen $oT(P,C)$, $oT(C,C)$, $oT(C,P)$, $oT(P,I)$, $oT(I,I)$, $oT(I,P)$, $oT(C,I)$, $oT(I,C)$, $oT(P,F)$, $oT(F,F)$, $oT(F,P)$, $oT(C,F)$, $oT(F,C)$, $oT(I,F)$, $oT(F,I)$ und $oT(P,A)$, $oT(A,A)$, $oT(A,P)$, $oT(A,C)$, $oT(C,A)$, $oT(I,A)$, $oT(A,I)$, $oT(F,A)$, $oT(A,F)$ betrachtet werden.

Zunächst wird $oT(P,P)$ untersucht. Die Erhaltung der Blickrichtungen hat zur Folge, daß nur Matrizen der Form

$$\begin{pmatrix} p & 0 & 0 \\ 0 & q & 0 \\ 0 & 0 & r \end{pmatrix}$$

und Permutationsmatrizen auftreten können. Permutationsmatrizen sind aber keine Untergruppentransformationen sondern vermitteln nur Äquivalenzen zwischen Raumgruppen. $oT(P,P)$ hat daher die Form

$$oT(P,P) = \left\{ \begin{pmatrix} p & 0 & 0 \\ 0 & q & 0 \\ 0 & 0 & r \end{pmatrix} \mid p, q, r \in \mathbb{Z}, pqr > 0 \right\}$$

Für die Teilmengen $o \subset (Z_1, Z_2)$ ergeben sich aufgrund der Forderung

$$T_{Z_1}^{-1} T T_{Z_2} \quad \text{ganzzahlig}$$

die folgenden Beschreibungen:

$$o \subset (P, C) = \left\{ \begin{pmatrix} 2p & 0 & 0 \\ 0 & 2q & 0 \\ 0 & 0 & r \end{pmatrix} \mid p, q, r \in \mathbb{Z}, 4pqr > 0 \right\}$$

$$o \subset (C, C) = \left\{ \begin{pmatrix} 2p & 0 & 0 \\ 0 & 2q & 0 \\ 0 & 0 & r \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 2p+1 & 0 & 0 \\ 0 & 2q+1 & 0 \\ 0 & 0 & r \end{pmatrix} \mid p, q, r \in \mathbb{Z} \right. \\ \left. 4pqr > 0, 4pqr + 2(p+q)r + r > 0 \right\}$$

$$o \subset (C, P) = o \subset (P, P) \quad \text{mit: } E \text{ ist Untergruppentransformation}$$

$$o \subset (P, I) = \left\{ \begin{pmatrix} 2p & 0 & 0 \\ 0 & 2q & 0 \\ 0 & 0 & 2r \end{pmatrix} \mid p, q, r \in \mathbb{Z}, 8pqr > 0 \right\}$$

$$o \subset (I, I) = \left\{ \begin{pmatrix} 2p & 0 & 0 \\ 0 & 2q & 0 \\ 0 & 0 & 2r \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 2p+1 & 0 & 0 \\ 0 & 2q+1 & 0 \\ 0 & 0 & 2r+1 \end{pmatrix} \mid p, q, r \in \mathbb{Z} \right. \\ \left. \det > 0 \right\}$$

$$o \subset (I, P) = o \subset (P, P) \quad \text{mit Eins}$$

$$o \subset (C, I) = \left\{ \begin{pmatrix} 2p & 0 & 0 \\ 0 & 2q & 0 \\ 0 & 0 & 2r \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 2p+1 & 0 & 0 \\ 0 & 2q+1 & 0 \\ 0 & 0 & 2r \end{pmatrix} \mid p, q, r \in \mathbb{Z} \right. \\ \left. \det > 0 \right\}$$

$$o \subset (I, C) = \left\{ \begin{pmatrix} 2p & 0 & 0 \\ 0 & 2q & 0 \\ 0 & 0 & r \end{pmatrix} \mid p, q, r \in \mathbb{Z}, 4pqr > 0 \right\}$$

$$o \subset (P, F) = \left\{ \begin{pmatrix} 2p & 0 & 0 \\ 0 & 2q & 0 \\ 0 & 0 & 2r \end{pmatrix} \mid p, q, r \in \mathbb{Z}, 8pqr > 0 \right\}$$

$$o\tau(F,F) = \left\{ \begin{pmatrix} 2p & 0 & 0 \\ 0 & 2p & 0 \\ 0 & 0 & 2r \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 2p+1 & 0 & 0 \\ 0 & 2q+1 & 0 \\ 0 & 0 & 2r+1 \end{pmatrix} \mid \begin{matrix} p,q,r \in \mathbb{Z} \\ \det > 0 \end{matrix} \right\}$$

$$o\tau(F,P) = o\tau(P,P) \text{ mit Eins}$$

$$o\tau(C,F) = \left\{ \begin{pmatrix} 2p & 0 & 0 \\ 0 & 2q & 0 \\ 0 & 0 & 2r \end{pmatrix} \mid p,q,r \in \mathbb{Z}, 8pqr > 0 \right\}$$

$$o\tau(F,C) = \left\{ \begin{pmatrix} 2p & 0 & 0 \\ 0 & 2q & 0 \\ 0 & 0 & r \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 2p+1 & 0 & 0 \\ 0 & 2q+1 & 0 \\ 0 & 0 & r \end{pmatrix} \mid \begin{matrix} p,q,r \in \mathbb{Z} \\ \det > 0 \end{matrix} \right\} \text{ mit Eins}$$

$$o\tau(I,F) = \left\{ \begin{pmatrix} 2p & 0 & 0 \\ 0 & 2q & 0 \\ 0 & 0 & 2r \end{pmatrix} \mid p,q,r \in \mathbb{Z}, 8pqr > 0 \right\}$$

$$o\tau(F,I) = \left\{ \begin{pmatrix} 2p & 0 & 0 \\ 0 & 2q & 0 \\ 0 & 0 & 2r \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 2p+1 & 0 & 0 \\ 0 & 2q+1 & 0 \\ 0 & 0 & 2r \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 2p+1 & 0 & 0 \\ 0 & 2q & 0 \\ 0 & 0 & 2r+1 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 2p & 0 & 0 \\ 0 & 2q+1 & 0 \\ 0 & 0 & 2r+1 \end{pmatrix} \mid \begin{matrix} p,q,r \in \mathbb{Z} \\ \det > 0 \end{matrix} \right\}$$

$$o\tau(P,A) = \left\{ \begin{pmatrix} p & 0 & 0 \\ 0 & 2q & 0 \\ 0 & 0 & 2r \end{pmatrix} \mid p,q,r \in \mathbb{Z}, 4pqr > 0 \right\}$$

$$o\tau(A,A) = \left\{ \begin{pmatrix} p & 0 & 0 \\ 0 & 2q & 0 \\ 0 & 0 & 2r \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} p & 0 & 0 \\ 0 & 2q+1 & 0 \\ 0 & 0 & 2r+1 \end{pmatrix} \mid \begin{matrix} p,q,r \in \mathbb{Z} \\ \det > 0 \end{matrix} \right\}$$

$$o\tau(A,P) = o\tau(P,P) \text{ mit Eins.}$$

$$o\tau(A,C) = \left\{ \begin{pmatrix} 2p & 0 & 0 \\ 0 & 2q & 0 \\ 0 & 0 & r \end{pmatrix} \mid p,q,r \in \mathbb{Z}, 4pqr > 0 \right\}$$

$$\text{OT}(C, A) = \left\{ \begin{pmatrix} p & 0 & 0 \\ 0 & 2q & 0 \\ 0 & 0 & 2r \end{pmatrix} \mid p, q, r \in \mathbb{Z}, 4pqr > 0 \right\}$$

$$\text{OT}(I, A) = \left\{ \begin{pmatrix} p & 0 & 0 \\ 0 & 2q & 0 \\ 0 & 0 & 2r \end{pmatrix} \mid p, q, r \in \mathbb{Z}, 4pqr > 0 \right\}$$

$$\text{OT}(A, I) = \left\{ \begin{pmatrix} 2p & 0 & 0 \\ 0 & 2q & 0 \\ 0 & 0 & 2r \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 2p & 0 & 0 \\ 0 & 2q+1 & 0 \\ 0 & 0 & 2r+1 \end{pmatrix} \mid p, q, r \in \mathbb{Z}, \det > 0 \right\}$$

$$\text{OT}(F, A) = \left\{ \begin{pmatrix} p & 0 & 0 \\ 0 & 2q & 0 \\ 0 & 0 & 2r \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} p & 0 & 0 \\ 0 & 2q+1 & 0 \\ 0 & 0 & 2r+1 \end{pmatrix} \mid p, q, r \in \mathbb{Z}, \det > 0 \right\} \text{ mit Eins}$$

$$\text{OT}(A, F) = \left\{ \begin{pmatrix} 2p & 0 & 0 \\ 0 & 2q & 0 \\ 0 & 0 & 2r \end{pmatrix} \mid p, q, r \in \mathbb{Z}, 8pqr > 0 \right\}$$

(b) Primtransformationen

Die Faktorzerlegung in $\text{OT}(P, P)$ ist sehr einfach

$$\begin{pmatrix} p & 0 & 0 \\ 0 & q & 0 \\ 0 & 0 & r \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} p & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & q & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & r \end{pmatrix}$$

Als Primtransformationen verbleiben also pa , qb und rc mit Primzahlen p, q, r .

In $\text{OT}(P, C)$ ist stets die Faktorisierung

$$\begin{pmatrix} 2p & 0 & 0 \\ 0 & 2q & 0 \\ 0 & 0 & r \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} p & 0 & 0 \\ 0 & q & 0 \\ 0 & 0 & r \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 2 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

möglich. Als Primtransformation verbleibt also ab .

In $\sigma_{\tau}(C,P)$ ist die Einheitsmatrix Untergruppentransformation, also die einzige Primtransformation.

In $\sigma_{\tau}(C,C)$ ist die Matrix

$$\begin{pmatrix} 2p & 0 & 0 \\ 0 & 2q & 0 \\ 0 & 0 & r \end{pmatrix} \text{ stets zerlegbar} = E \begin{pmatrix} p & 0 & 0 \\ 0 & q & 0 \\ 0 & 0 & r \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 2 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

$\sigma_{\tau}(C,P)$
 $\begin{matrix} \uparrow & \uparrow & \uparrow \\ o(P,P) & o(P,C) & \end{matrix}$

also ergibt sich daraus keine Primtransformation.

Im zweiten Fall gilt:

$$\begin{pmatrix} 2p+1 & 0 & 0 \\ 0 & 2q+1 & 0 \\ 0 & 0 & r \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2p+1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 2q+1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & r \end{pmatrix}$$

Falls $2+1$ bzw. $2q+1$, r prim sind erhält man die Primtransformationen

$$(2p+1)a, (2q+1)b \text{ und } rc$$

Für $\sigma_{\tau}(C,I)$ gilt

$$\begin{pmatrix} 2p & 0 & 0 \\ 0 & 2q & 0 \\ 0 & 0 & 2r \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} p & 0 & 0 \\ 0 & q & 0 \\ 0 & 0 & r \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 2 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 2 \end{pmatrix}$$

$\uparrow \quad \quad \uparrow \quad \quad \uparrow \quad \quad \uparrow$
 $\sigma_{\tau}(C,P) \quad \sigma_{\tau}(P,P) \quad \sigma_{\tau}(P,C) \quad \sigma_{\tau}(C,I)$

es verbleibt c als Primtransformation

$$\begin{pmatrix} 2p+1 & 0 & 0 \\ 0 & 2q+1 & 0 \\ 0 & 0 & 2r \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2p+1 & 0 & 0 \\ 0 & 2q+1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 2 \end{pmatrix}$$

$\sigma_{\tau}(C,C) \quad \sigma_{\tau}(C,I)$

Auch hieraus folgt nur c als Primtransformation.

In $\sigma\tau(P, I)$ gilt

$$\begin{pmatrix} 2p & 0 & 0 \\ 0 & 2q & 0 \\ 0 & 0 & 2r \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2p & 0 & 0 \\ 0 & 2q & 0 \\ 0 & 0 & r \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 2 \end{pmatrix}$$

$\uparrow$ $\uparrow$
 $\sigma\tau(P, C)$ $\sigma\tau(C, I)$

also gibt es keine Primtransformation in $\sigma\tau(P, I)$, $\sigma\tau(I, P)$ enthält als Primtransformation die Eins e.

In $\sigma\tau(I, I)$ läßt sich

$$\begin{pmatrix} 2q & 0 & 0 \\ 0 & 2p & 0 \\ 0 & 0 & 2r \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} 2q & 0 & 0 \\ 0 & 2p & 0 \\ 0 & 0 & 2r \end{pmatrix}$$

$\uparrow$ $\uparrow$
 $\sigma(I, P)$ $\sigma(P, I)$

stets faktorisieren.

$$\begin{pmatrix} 2p+1 & 0 & 0 \\ 0 & 2q+1 & 0 \\ 0 & 0 & 2r+1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2p+1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 2q+1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 2r+1 \end{pmatrix}$$

Als Primtransformationen verbleiben $(2p+1)a$, $(2q+1)b$ und $(2r+1)c$, falls die Faktoren Primzahlen sind. Die Matrizen von $\sigma\tau(I, C)$ lassen sich stets durch $\sigma\tau(I, P)$ und $\sigma\tau(P, C)$ faktorisieren. In $\sigma\tau(P, F)$ ist stets zu faktorisieren:

$$\begin{pmatrix} 2p & 0 & 0 \\ 0 & 2q & 0 \\ 0 & 0 & 2r \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} p & 0 & 0 \\ 0 & q & 0 \\ 0 & 0 & r \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 2 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 2 \end{pmatrix}$$

Die Transformation abc kann weder in (P, C) (C, F) noch in (P, I) (I, F) noch in (P, A) (A, F) aufgespalten werden. Sie ist daher prim.

In $\sigma\tau(F,C)$ ist wieder die Dezentrierung e Primtransformation.
Daher ist in $\sigma\tau(F,F)$

$$\begin{pmatrix} 2p & 0 & 0 \\ 0 & 2q & 0 \\ 0 & 0 & 2r \end{pmatrix} \quad \text{stets faktorisiert in } \sigma\tau(F,C) \text{ und } \sigma\tau(C,F)$$

Dagegen sind die Faktoren

$$\begin{pmatrix} 2p+1 & 0 & 0 \\ 0 & 2q+1 & 0 \\ 0 & 0 & 2r+1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 2r+1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 2q+1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 2p+1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

nicht faktorisiert, wenn $2r+1$, $2q+1$, $2q+1$ prim sind

Also erhält man die Primtransformationen $(2p+1)a$, $(2q+1)b$,
 $(2r+1)c$.

$\sigma\tau(F,P)$ läßt sich stets zerlegen in $\sigma\tau(F,C)$ und $\sigma\tau(C,P)$ also
keine Primtransformation

$\sigma\tau(C,F)$ läßt sich in $\sigma\tau(C,P)$ und $\sigma\tau(P,F)$ zerlegen.

$\sigma\tau(I,F)$ ist stets faktorisiert in $\sigma\tau(I,P)$ und $\sigma\tau(P,F)$

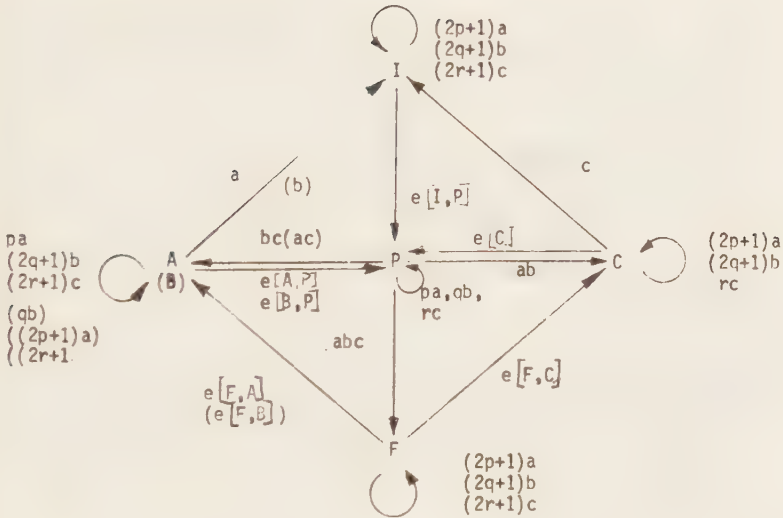
$\sigma\tau(F,I)$ ist zerlegbar in $\sigma\tau(F,C)$ und $\sigma\tau(C,I)$

bzw. $\sigma\tau(F,B)$ und $\sigma\tau(B,I)$

bzw. $\sigma\tau(F,A)$ und $\sigma\tau(A,I)$

Die Sachverhalte bei den Transformationen mit A-Gittern entsprechen denen im Fall C. Nur die Beziehungen (A,C) und (C,A) müssen noch untersucht werden. $\sigma\tau(A,C)$ ist zerlegbar in $\sigma\tau(A,P)$ und $\sigma\tau(P,C)$. Entsprechend ist $\sigma\tau(C,A)$ zerlegbar in $\sigma\tau(C,P)$ und $\sigma\tau(P,A)$.

Die Zusammenfassung der Primtransformationen ergibt folgenden Graphen:



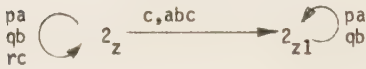
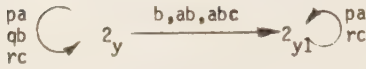
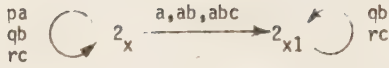
(c) Reduktion der Primtransformationen

Zum orthorhombischen System gehören die Punktgruppen 222, mm2 und $\frac{2}{m} \frac{2}{m} \frac{2}{m}$. An Erzeugende treten also 2_x , 2_y , 2_z , m_x , m_y und m_z auf. Die Kennstellenvektoren sind

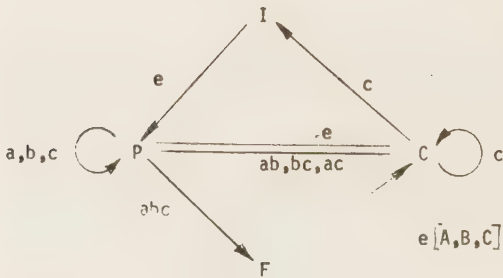
$$T_{K2_y} = (t, 0, 0), T_{K2_y} = (0, t, 0), T_{K2_z} = (0, 0, t), T_{Km_x} = (0, t^2, t^3),$$

$$T_{Km_y} = (t^1, 0, t^3), T_{Km_z} = (t^1, t^2, 0).$$

Zuerst sollen die zweizähligen Achsen betrachtet werden. Es gilt $2T_K = G$ mit einem Gittervektor G ; also können für t nur Werte 0 und 1/2 vorkommen. Das Transformationsverhalten der zweizähligen Achsen ist in den folgenden Graphen zusammengefaßt:



Da nur Kennstellen 0 und 1/2 auftreten können, führen in der Kristallklasse 222 nur die im folgenden reduzierten Diagramm angegebenen Transformationen auf inäquivalente Untergruppen. Außerdem existiert für 222 kein BRAVAIS-Gitter A, weshalb der ganze Graph verkürzt werden kann.



Für die Raumgruppenklassen der Kristallklasse 222 ergibt sich daraus das folgende Ableitungsschema:

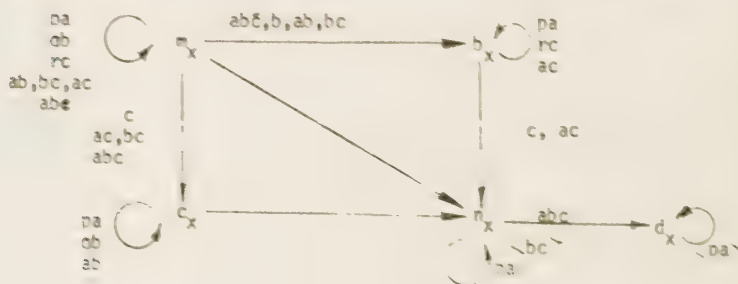
	a	b	c	ab	bc	ac	abc	e
P222	P2 ₁ 22 (P222 ₁)	P22 ₁ 2 (P222 ₁)	P222 ₁	C222	A222 (C222)	B222 (C222)	F222	-
P222 ₁	P2 ₁ 22 ₁ (P2 ₁ 2 ₁ 2)	P22 ₁ 2 ₁ (P2 ₁ 2 ₁ 2)	-	C222 ₁	-	-	-	-
C222	-	-	C222 ₁ I222 I2 ₁ 2 ₁ 2 ₁	-	-	-	-	P222, P2 ₁ 2 ₁ 2 P2 ₁ 22(P222 ₁) P22 ₁ 2(P222 ₁) P222 ₁
F222	-	-	-	-	-	-	-	C222, C222 ₁ B222(C222) B22 ₁ 2(C222 ₁) A222(C222) A2 ₁ 22(C222 ₁)
P2 ₁ 2 ₁ 2	-	-	P2 ₁ 2 ₁ 2 ₁	-	-	-	-	-
C222 ₁	-	-	-					P222 ₁ , P2 ₁ 2 ₁ 2 ₁ P2 ₁ 22 ₁ (P2 ₁ 2 ₁ 2), P22 ₁ 2 ₁ (P2 ₁ 2 ₁ 2)
I222	-	-	-	-	-	-	-	P222, P2 ₁ 2 ₁ 2 P2 ₁ 22 ₁ (P2 ₁ 2 ₁ 2) P22 ₁ 2 ₁ (P2 ₁ 2 ₁ 2)
I2 ₁ 2 ₁ 2 ₁	-	-	-	-	-	-	-	P2 ₁ 2 ₁ 2 ₁ , P222 ₁ , P2 ₁ 22(P222 ₁) P22 ₁ 2(P222 ₁)

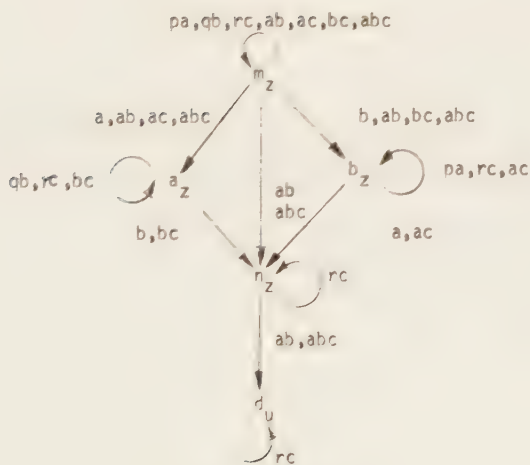
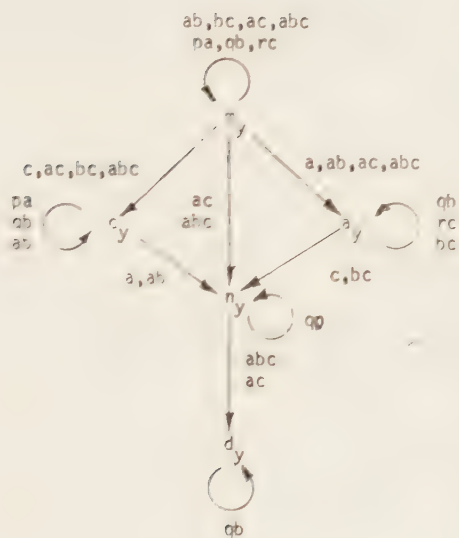
Es ist dabei zu beachten, daß eine 2-Achse im Symbol einer P-Gruppe bedeutet, daß die beiden anderen Achsen sich nicht schneiden. In zentrierten Raumgruppen ist diese Lagebeziehung nicht mehr eindeutig, im Symbol wird eine primitive Untergruppe angegeben. Das hat zur Folge, daß bei zentrierten Gruppen der Klasse 222 die Untergruppenbeziehungen aus den Symbolen ohne Zusatzregeln nicht eindeutig zu erkennen sind. Deshalb verfährt man in diesem Fall so, daß man die Untergruppen durch Transformation der Raumgruppenmatrizen ableitet.

Die Kennstellervektoren der Spiegelebenen lassen wegen der Bedingung $2T_{km} = G$ in P- und I-Gittern nur die Werte 0 und $1/2$ zu, also die Spiegelebene m und die Gleitspiegelebene a, b, c, n . In flächenzentrierten Gittern existieren auch noch die Möglichkeiten $T_{km} = (1/4 \ 1/4 \ 0)$, $T_{km} = (1/4 \ 0 \ 1/4)$, $T_{km} = (0 \ 1/4 \ 1/4)$, also Gleitspiegelebenen d .

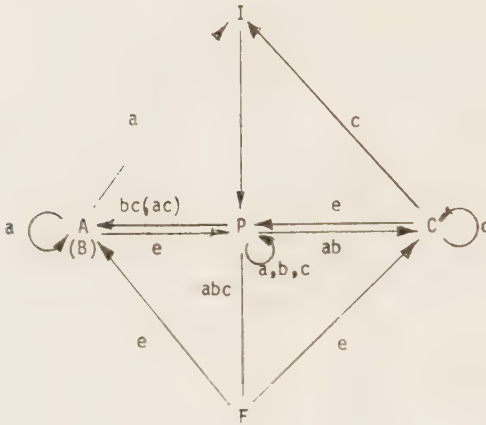
Ist etwa $T_{km} = (0 \ 1/4 \ 1/4)$ so folgt wegen $2T_{km} = G$, daß ein A-Gitter vorliegen muß. Nun ist aber $m_{xy} = 2z$, woraus folgt, daß T_{km} von der Form $(t \ 0 \ 1/4)$ sein muß, weil sonst $T_{km} = (0 \ 0 \ 1/4)$ wäre, was wegen $2T_{km} = G$ nicht möglich ist. Also muß auch die B-Fläche zentriert sein, woraus folgt, daß ein F-Gitter vorliegt. Also ist d nur im F-Gitter möglich.

Für m_x , m_y und m_z ergeben sich die folgenden Transformationsmöglichkeiten:





Aufgrund der Kennstellenbetrachtungen reduziert sich das Diagramm der maximalen inäquivalenten Untergruppentransformationen für $mm2$ auf:



Daraus erhält man das folgende Schema der Untergruppenableitung. Mengen der Zahl der Untergruppenbeziehungen zunächst die P-P-Beziehungen

	a	b	c		
Pmm2	Pma2	Pbm2 (Pma2)	Pmc2 ₁	Pcm2 ₁ (Pmc2 ₁)	Pcc2
Pma2	-	Pba2	Pnm2 ₁	Pca2 ₁	Pcn2 (Pnc2)
Pmc2 ₁	Pmn2 ₁	Pbc2 ₁ (Pca2 ₁)	-	-	-
Pcc2	Pcn2 (Pnc2)	Pnc2	-	-	-
Pba2	-	-	Pbn2 ₁ (Pna2 ₁)	Pna2 ₁	Pnn2
Pmn2 ₁	-	Pbn2 ₁ (Pna2 ₁)	-	-	-
Pca2 ₁	-	Pna2 ₁	-	-	-
Pnc2	Pnn2	-	-	-	-
Pna2 ₁	-	-	-	-	-
Pnn2	-	-	-	-	-

Das folgende Schema enthält die (P,A)-, (P,B)- und (P,C)-Untergruppenbeziehungen:

	ab	ac	bc
Pmm2	$C(m,b)(m,a)2$	$B(m,c)(m,n)(2,2_1)$ $(A(m,n)(m,c)(2,2_1))$ $B(m,c)(a,c)(2,2_1)$ $(A(b,c)(m,c)(2,2_1))$	$A(m,n)(m,c)(2,2_1)$ $A(b,c)(m,c)(2,2_1)$
Pma2	-	-	$A(m,n)(a,n)(2,2_1)$ $A(b,c)(a,n)(2,2_1)$

Pmc_1	$C(m,b)(c,n)2_1$	-	-
$Pcc2$	$C(c,n)(c,n)2$	-	-
$Pba2$	-	-	-
$Pmn2_1$	-	-	-
$Pca2_1$	-	-	-
$Pnc2$	-	-	-
$Pna2_1$	-	-	-
$Pnn2$	-	-	-

Die (P,F) - Untergruppen stehen im folgenden Schema:

Pmc	$F(m,b,c,n)(m,a,c,n)(2,2_1)$
$Pma2$	-
$Pmc2_1$	-
$Pcc2$	-
$Pba2$	-
$Pba2$	-
$Pmn2_1$	-
$Pca2_1$	-
$Pnc2$	-
$Pna2_1$	-
$Pnn2$	$F(d)(d)(2,2_1)$

Die Untergruppen von C- und A-Obergruppen stehen in dem folgenden Tabellen

	C	A
$C(m,b)(m,a)2$	$C(c,n)(c,n)2$ $C(m,b)(c,n)2_1$ $C(c,n)(m,a)2_1$	$Pmm2, Pma2 \quad Pbm2, Pba2$
$C(m,b)(c,n)2_1$	-	$Pmc2_1, Pmn2_1, Pbc2_1 (Pca2_1),$ $Pbn2_1 (Pna2_1)$
$C(c,n)(c,n)2$	-	$Pcc2, Pcn2 \equiv Pnc2, Pnn2$

	A	C
$A(m,n)(m,c)(2,2_1)$	$A(m,n)(a,n)(2,2_1)$	$Pmm2, Pmc2_1, Pnm2_1 (Pmn2_1),$ $Pnc2$
$A(b,c)(m,c)(2,2_1)$	$A(b,c)(a,n)(2,2_1)$	$Pbm2 (Pma2), Pbc2_1 (Pca2_1),$ $Pcm2_1 (Pmc2_1), Pcc2$
$A(m,n)(a,n)(2,2_1)$	-	$Pma2, Pmn2_1, Pna2_1, Pnn2$
$A(b,c)(a,n)(2,2_1)$	-	$Pba2, Pbn2_1 (Pna2_1) Pca2_1,$ $Pcn2 (Pnc2)$

Die Kurzsymbole der in den Tabellen aufgeführten zentrierten Gruppen sind:

$$C(m,b)(m,a)2 = Cmm2, C(m,b)(c,n)2_1 = Cmc2_1.$$

$$C(c,n)(c,n)2 = Ccc2, A(m,n)(m,c)(2,2_1) = Amm2,$$

$$A(b,c)(m,c)(2,2_1) = Abm2, A(m,n)(a,n)(2,2_1) = Ama2,$$

$$A(b,c)(a,n)(2,2_1) = Aba2$$

$$F(m,b,c,n)(m,a,c,n)(2,2_1) = Fmm2$$

$$F(d)(d)(2,2_1) = Fdd2$$

Es folgen die (C,I) und (A,I) Untergruppen:

	c
$C(m,b)(m,a)2$	$I(m,n)(m,n)(2,2_1)$ $I(b,c)(m,n)(2,2_1)$ $I(m,n)(a,c)(2,2_1)$ $I(b,c)(a,c)(2,2_1)$
$C(m,b)(c,n)2_1$	-
$C(c,n)(c,n)2$	-

	a
$A(m,n)(m,c)(2,2_1)$	$I(m,n)(m,n)(2,2_1)$ $I(m,n)(a,c)(2,2_1)$
$A(b,c)(m,c)(2,2_1)$	$I(b,c)(m,n)(2,2_1)$ $(I(m,n)(a,c)(2,2_1))$ $I(b,c)(a,c)(2,2_1)$
$A(m,n)(a,n)(2,2_1)$	-
$A(b,c)(a,n)(2,2_1)$	-

Die Kurzsymbole für die I-Gruppen sind:

$$I(m,n)(m,n)(2,2_1) = Imn2$$

$$I(m,n)(a,c)(2,2_1) = Ima2$$

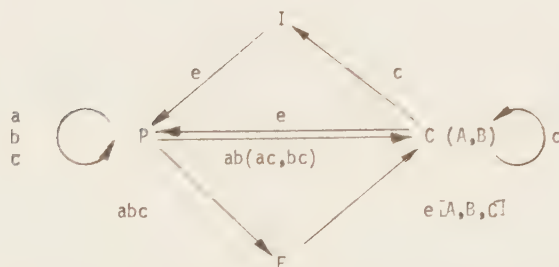
$$I(b,c)(a,c)(2,2_1) = Iba2$$

Nun sind nur noch die P-Untergruppen der I-Gruppen und die A- und C-Untergruppen der F-Gruppen anzugeben:

$I(m,n)(m,n)(2,2_1)$	$Pnm2, Pmn2_1 \equiv Pnm2_1, Pnn2$
$I(m,n)(a,c)(2,2_1)$	$Pma2, Pmc2_1, Pna2_1, Pnc2$
$I(b,c)(a,c)(2,2_1)$	$Pba2, Pbc2_1 \equiv Pca2_1, Pcc2$

	e
$F(m,b,c,n)(m,a,c,n)(2,2_1)$	$C(m,b)(m,a)2$ $C(m,b)(c,n)2_1$ $C(c,n)(m,a)2_1$ $C(c,n)(c,n)2$ $A(m,n)(m,c)(2,2_1)$ $A(m,n)(a,n)(2,2_1)$ $A(b,c)(m,c)(2,2_1)$ $A(h,c)(a,n)(2,2_1)$ $B(m,c)(m,n)(2,2_1) \quad (Amm2)$ $B(m,c)(a,c)(2,2_1) \quad (Abm2)$ $B(b,n)(m,n)(2,2_1) \quad (Ama2)$ $B(b,n)(a,c)(2,2_1) \quad (Aba2)$
$F(d)(d)(2,2_1)$	-

Für die Kristallklasse mmm erhält man den folgenden reduzierten Graphen:



Wegen der großen Zahlen der orthorhombischen Untergruppenbeziehungen ist es auch hier erforderlich, die Ableitung aufzuteilen. Zunächst sollen die (P,P)-Untergruppenbeziehungen hergeleitet werden. Danach kommen die (P,C)-Untergruppenbeziehungen und anschließend die (P,F)-Beziehungen.

	ab		ac		bc	
Pmmn	$C(m,b)(m,a)(m,n)$	$C(m,b)(m,a)(a,b)$	$B(m,c)(m,n)(m,a)$ (Cmma)	$B(m,c)(a,c)(m,a)$ (Cmma)	$A(m,n)(m,c)(m,b)$ (Cmmn)	$A(b,c)(m,c)(m,b)$ (Cmma)
Pmma	-	-	-	-	$A(m,n)(m,c)(a,n)$ (Cmcm)	$A(b,c)(m,c)(a,n)$ (Cmca)
Pccm	$C(c,n)(c,n)(m,n)$	$C(c,n)(c,n)(a,b)$	-	-	-	-
Pmmn	-	-	-	-	-	-
Pbcm	-	-	-	-	-	-
Pmna	-	-	-	-	-	-
Pbam	-	-	-	-	-	-
Pcca	-	-	-	-	-	-
Pban	-	-	-	-	-	-
Pma	-	-	-	-	-	-
Pccn	-	-	-	-	-	-
Pbca	-	-	-	-	-	-
Pbcn	-	-	-	-	-	-
Pnm	-	-	-	-	-	-
Pna	-	-	-	-	-	-
Pnn	-	-	-	-	-	-

	abc
Pmmm	$F(m,b,c,n)(m,a,c,n)(m,a,b,n)$
Pmma	-
Pccm	-
Pmmn	-
Pbcm	-
Pmna	-
Pbam	-
Pcca	-
Pban	-
Pnma	-
Pccn	-
Pbca	-
Pbcn	-
Pnmm	-
Pnna	-
Pnnn	$F(d)(d)(d)$

Für (C,C) -Untergruppenbeziehungen gibt es nur die Transformation c

	c		
$C(m,b)(m,a)(m,n)$	$C(m,b)(c,n)(m,n)$	$C(c,n)(m,a)(m,n)$ (Cmcm)	$C(c,n)(c,n)(m,n)$
$C(m,b)(m,a)(a,b)$	$C(m,b)(c,n)(a,b)$	$C(c,n)(m,a)(a,b)$ (Cmca)	$C(c,n)(c,n)(a,b)$
$C(m,b)(c,n)(m,n)$	-	-	-
$C(m,b)(c,n)(a,b)$	-	-	-
$C(c,n)(c,n)(m,n)$	-	-	-
$C(c,n)(c,n)(a,b)$	-	-	-

(C,I)-Untergruppenbeziehungen:

c

$C(m,b)(m,a)(m,n)$	$I(m,n)(m,n)(m,n)$	$I(b,c)(m,a)(m,n)$ (Imma)	$I(m,n)(a,c)(m,n)$ (Imma)	$I(b,c)(a,c)(m,n)$
$C(m,b)(m,a)(a,b)$	$I(m,n)(m,n)(a,b)$	$I(b,c)(m,n)(a,b)$ (Ibam)	$I(m,n)(a,c)(a,b)$ (Ibam)	$I(b,c)(a,c)(a,b)$ (Ibca)
$C(m,b)(c,n)(m,n)$	-	-	-	-
$C(m,b)(c,n)(a,b)$	-	-	-	-
$C(c,n)(c,n)(m,n)$	-	-	-	-
$C(c,n)(c,n)(a,b)$	-	-	-	-

C-P-Untergruppenbeziehungen:

e

$C(m,b)(m,a)(m,n)$	Pmmm	Pmmn	Pmam (Pmma)	Pman (Pncm) (Pmna)	Pbmm (Pmma)	Pbmn (Pncm) (Pmna)	Pbam	Pban
$C(m,b)(m,a)(a,b)$	Pmma	Pmmnb (Pmma)	Pmaa (Pccm)	Pmab (Pbcm)	Pbma (Pbcm)	Pbmb (Pccm)	Pbaa (Pcca)	Pbab (Pcca)
$C(m,b)(c,n)(m,n)$	Pmcm (Pmma)	Pmcn (Pmma)	Pmnm (Pmma)	Pmnn (Pnnm)	Pbcm	Pbcn	Pbnm (Pmma)	Pbnn (Pnna)
$C(m,b)(c,n)(a,b)$	Pmca (Pbcm)	Pmcb (Pbam)	Pmna (Pmma)	Pmnb (Pmma)	Pbca (Pcca)	Pbcb (Pcca)	Pbna (Pbcn)	Pbnb (Pccn)
$C(c,n)(c,n)(m,n)$	Pccm	Pccn	Pcnm (Pmma)	Pcnn (Pnna)	Pncm (Pmma)	Pncn (Pnna)	Pnnm	Pnnn
$C(c,n)(c,n)(a,b)$	Pcca	Pccb (Pcca)	Pcna (Pban)	Pcnb (Pbcn)	Pnca (Pbcn)	Pncb (Pban)	Pnna	Pnnb (Pnna)

(I,P)-Untergruppenbeziehungen

e

$I(m,n)(m,n)(m,n)$	Pmmm	Pmmn	Pmnm (Pmmn)	Pmnn (Pnnm)	Pnmm (Pmmn)	Pnmn (Pnnm)	Pnnm	Pnnn
$I(m,n)(m,n)(a,b)$	Pmma	Pmmnb (Pmma)	Pmna (Pmma)	Pmnb (Pmma)	Pnma	Pnmb (Pmma)	Pnna	Pnnb (Pnna)
$I(b,c)(a,c)(m,n)$	Pbam	Pban	Pbcm	Pbcn	Pcam (Pbcm)	Pcan (Pbcn)	Pccm	Pccn
$I(b,c)(a,c)(a,b)$	Pbaa (Pcca)	Pbab (Pcca)	Pbca	Pbcb (Pcca)	Pcaa (Pcca)	Pcab (Pbca)	Pcca	Pccb (Pcca)

(F,C)-Untergruppenbeziehungen

$F(m,b,c,n)(m,a,c,n)(m,a,b,n):$

e

$C(m,b)(m,a)(m,n), C(m,b)(m,a)(a,b), C(m,b)(c,n)(m,n),$
 $(Cmnm) (Cmma) (Cmcm)$

$C(m,b)(c,n)(a,b), C(c,n)(m,a)(m,n), C(c,n)(m,a)(a,b),$
 $(Cmca) (Cmcm) (Cmca)$

$C(c,n)(c,n)(m,n), C(c,n)(c,n)(a,b), B(m,c)(m,n)(m,a)$
 $(Cccm) (Ccca) (Cmnm)$

$B(m,c)(m,n)(b,n), B(m,c)(a,c)(m,a), B(m,c)(a,c)(b,n)$
 $(Cmcm) (Cmma) (Cmca)$

$B(b,c)(m,n)(m,a), B(b,c)(m,n)(b,n), B(b,c)(a,c)(m,a)$
 $(Cmcm) (Cccm) (Cmca)$

$B(b,c)(a,c)(b,n), A(m,n)(m,c)(m,b), A(m,n)(m,c)(a,n)$
 $(Ccca) (Cmnm) (Cmcm)$

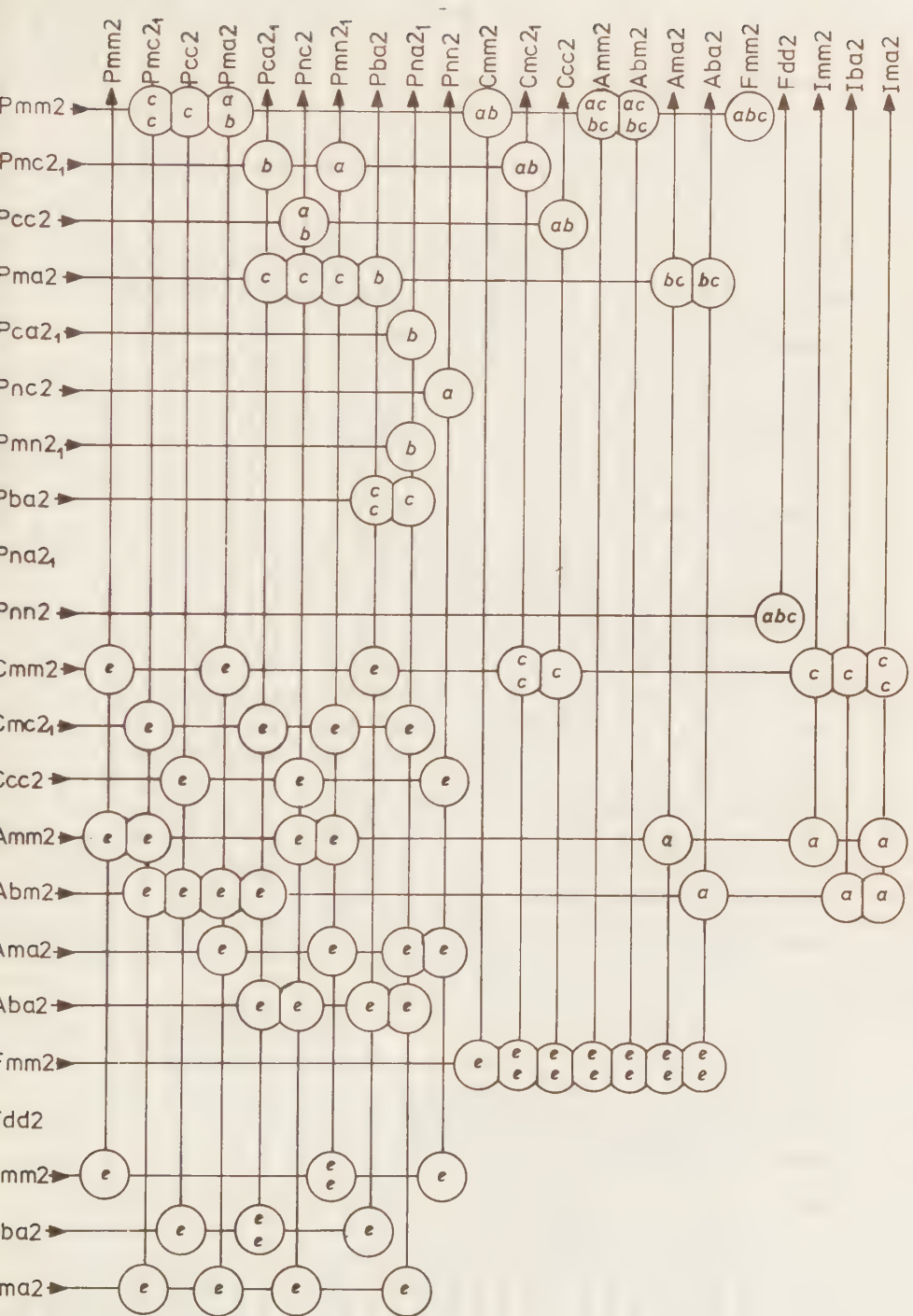
$A(m,n)(a,n)(m,b), A(m,n)(a,n)(a,n), A(b,c)(m,c)(m,b)$
 $(Cmcm) (Cccm) (Cmma)$

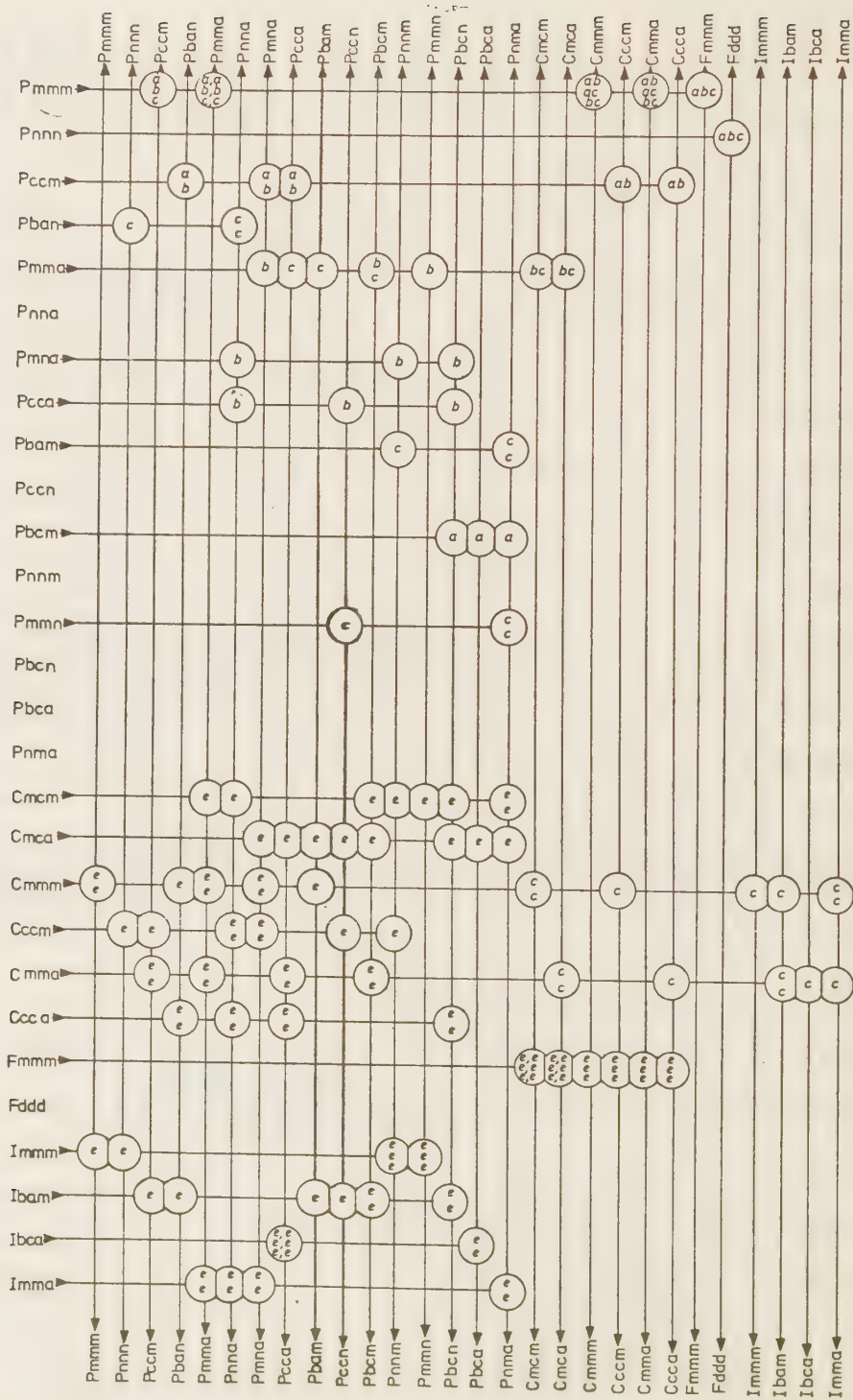
$A(b,c)(m,c)(a,n), A(b,c)(a,n)(m,b), A(b,c)(a,n)(a,n)$
 $(Cmca) (Cmca) (Ccca)$

$F(d)(d)(d):$

-

Damit sind alle maximalen klassengleichen inäquivalenten Untergruppenbeziehungen im orthorhombischen System hergeleitet. Die Untergruppendiagramme werden zweckmäßigerweise ähnlich wie die Ableitungstabellen in Teildiagramme zerlegt.





7.4. Tetragonale Kristallfamilie

(a) Tetragonale Transformationshalbgruppe $t\tau$

Die tetragonale Systemgruppe $t\overline{4}2d$ wird erzeugt von der Drehgruppe und den Matrizen der Form

$$\begin{pmatrix} p & 0 & 0 \\ 0 & p & 0 \\ 0 & 0 & q \end{pmatrix}$$

Es gibt die BRAVAIS-Gitter P und I. Deshalb sind außer $t\tau(P,P)$ die Teilmengen $t\tau(P,I)$, $t\tau(I,I)$ und $t\tau(I,P)$ zu untersuchen. Zunächst wird $t\tau(P,P)$ betrachtet. Die Tatsache, daß nur gleichberechtigte Blickrichtungen aufeinander abgebildet werden können, hat zur Folge, daß die stets besetzte erste Blickrichtung immer auf sich abgebildet werden muß. Für die tetragonalen Punktgruppen 4 , $\overline{4}$ und $4/m$, in denen nur die erste Blickrichtung besetzt ist, wird $t\tau(P,P)_1$ daher erzeugt von allen Matrizen mit ganzzahligen Koeffizienten,

$$\begin{pmatrix} p & r & 0 \\ q & s & 0 \\ 0 & 0 & t \end{pmatrix},$$

die den tetragonalen Bedingungen

$$p^2 + q^2 = r^2 + s^2$$

$$pr + qs = 0 \quad (\Rightarrow p^2 r^2 = q^2 s^2)$$

genügen, also folgt

$$\begin{aligned} p^2 s^2 + q^2 s^2 &= r^2 s^2 + s^4 \\ \Rightarrow p^2 s^2 + p^2 r^2 &= r^2 s^2 + s^4 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 p^2(s^2 + r^2) &= s^2(s^2 + r^2) \\
 \Rightarrow (s^2 - p^2)(s^2 + r^2) &= 0 \\
 \Rightarrow s^2 &= p^2 \quad (\Rightarrow s = \pm p) \\
 \Rightarrow r^2 &= q^2 \quad (\Rightarrow r = \pm q)
 \end{aligned}$$

Zu (p,q) gehören also die Lösungen $(r,s)_1 = (q,-p)$ und $(r,s)_2 = (-q,p)$. Für die oben angeführten Kristallklassen besteht also $t\tau(P,P)_1$ aus allen Matrizen der Form

$$\begin{pmatrix} p & q & 0 \\ q & -p & 0 \\ 0 & 0 & t \end{pmatrix} \quad \text{und} \quad \begin{pmatrix} p & -q & 0 \\ q & p & 0 \\ 0 & 0 & t \end{pmatrix}$$

soweit sie positive Determinante haben.

In den restlichen tetragonalen Punktgruppen 422, $4mm$, $\bar{4}2m$ und $\frac{4}{m}mm$ kommt als zusätzliche Bedingung hinzu, daß entweder die Richtungen einer Blickrichtung aufeinander abgebildet werden oder die zweite und dritte Blickrichtung vertauscht werden können. Die Halbgruppe $t\tau(P,P)_2$ wird daher erzeugt von den Matrizen

$$\begin{pmatrix} p & 0 & 0 \\ 0 & p & 0 \\ 0 & 0 & t \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 & -p & 0 \\ p & 0 & 0 \\ 0 & 0 & t \end{pmatrix} \quad \text{und} \quad \begin{pmatrix} p & -p & 0 \\ p & p & 0 \\ 0 & 0 & t \end{pmatrix}$$

wobei natürlich p und t ganze Zahlen sind. Da die Transformation

$$\begin{pmatrix} 1 & -1 & 0 \\ 1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

im tetragonalen System eine besondere Rolle spielt, erhält sie eine eigene Bezeichnung: v .

Die Teilmengen $t\tau(Z_1, Z_2)$ ergeben sich aus der Ganzzahligkeitsbedingung für

$$\tau_{Z_1}^{-1} \tau \tau_{Z_2}$$

Die Matrizen von $t\tau(P, I)_1$ haben daher die Form:

$$\begin{pmatrix} 2p & 2q & 0 \\ 2q & -2p & 0 \\ 0 & 0 & 2t \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 2p+1 & 2q+1 & 0 \\ 2q+1 & -(2p+1) & 0 \\ 0 & 0 & 2t \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 2p & -2q & 0 \\ 2q & 2p & 0 \\ 0 & 0 & 2t \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 2p+1 & -(2q+1) & 0 \\ 2q+1 & 2p+1 & 0 \\ 0 & 0 & 2t \end{pmatrix}$$

$t\tau(I, I)_1$ enthält alle Matrizen von $t\tau(P, P)_1$, bei denen $p+q+t \equiv 0(2)$ ist.

Schließlich enthält $t\tau(I, P)_1$ alle Transformationen aus $t\tau(P, P)_1$.

Zusätzlich ist die Einheitsmatrix Untergruppentransformation.

Entsprechend erhält man für $t\tau(P, I)_2$, daß nur Matrizen der folgenden Form (P, I) -Transformationen ergeben:

$$\begin{pmatrix} 2p & 0 & 0 \\ 0 & 2p & 0 \\ 0 & 0 & 2t \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 & -2p & 0 \\ 2p & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 2t \end{pmatrix} \quad \text{und} \quad \begin{pmatrix} p & -p & 0 \\ p & p & 0 \\ 0 & 0 & 2t \end{pmatrix}$$

Die Teilmenge $t\tau(I, I)_2$ enthält die Matrizen

$$\begin{pmatrix} 2p & 0 & 0 \\ 0 & 2p & 0 \\ 0 & 0 & 2t \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 2p+1 & 0 & 0 \\ 0 & 2p+1 & 0 \\ 0 & 0 & 2t+1 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 & -2p & 0 \\ 2p & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 2t \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 & -(2p+1) & 0 \\ 2p+1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 2t+1 \end{pmatrix} \quad \text{und}$$

$$\begin{pmatrix} p & -p & 0 \\ p & p & 0 \\ 0 & 0 & 2t \end{pmatrix}$$

Schließlich enthält $t\tau(I,P)_2$ neben den Transformationen von $t\tau(P,P)_2$ auch noch die Einheitsmatrix als Untergruppentransformation, die der Dezentrierung entspricht.

(b) Primtransformationen

Für die Transformationshalbgruppe $t\tau(P,P)_1$ gestaltet sich das Faktorisierungsproblem etwas komplizierter als bisher. Deshalb sollen hier nicht sämtliche Primtransformationen abgeleitet werden, sondern nur diejenigen, die maximalen inäquivalenten Untergruppenbeziehungen entsprechen.

Natürlich lassen die Matrizen von $t\tau(P,P)_1$ stets die folgenden Faktorisierungen zu:

$$\begin{pmatrix} p & q & 0 \\ q & -p & 0 \\ 0 & 0 & t \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} p & q & 0 \\ q & -p & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & t \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} p & -q & 0 \\ q & p & 0 \\ 0 & 0 & t \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} p & -q & 0 \\ q & p & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & t \end{pmatrix}$$

Der Kennstellenvektor T_K eine vierzähligen Achse in z-Richtung hat die Form $(00t)$, wobei wegen $(4_z, T)^4 = (1, 4T_K) = (1, G)$ t die Werte 0, 1/4, 1/3 und 3/4 annehmen kann. Der Kennstellenvektor ist also invariant unter Transformationen

$$\begin{pmatrix} p & q & 0 \\ q & -p & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad \text{und} \quad \begin{pmatrix} p & -q & 0 \\ q & p & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix},$$

diese können in Raumgruppen der Kristallklassen $\bar{4}$ und 4 nur auf

äquivalente Untergruppen führen. Eine sorgfältigere Betrachtung ist für die Kristallklasse 4/m erforderlich. Der Kennstellenvektor von m_z ist $T_K = (t^1 t^2 0)$. Da $2T_K$ Gittervektor sein muß, gilt:

t^1 und t^2 können nur die Werte 0 oder 1/2 annehmen. Das hat zur Folge, daß nur dann inäquivalente Untergruppen auftreten können, wenn einer der Punkte

$$\begin{pmatrix} 1/2 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 \\ 1/2 \\ 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 1/2 \\ 1/2 \\ 0 \end{pmatrix}$$

der transformierten Zelle Gitterpunkt bzgl. der Ausgangsbasis ist, d.h. für die Matrix

$$\begin{pmatrix} p & q & 0 \\ q & -p & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

daß

$$\begin{pmatrix} p/2 \\ q/2 \\ 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} q/2 \\ -p/2 \\ 0 \end{pmatrix} \quad \text{oder} \quad \begin{pmatrix} (p+q)/2 \\ (q-p)/2 \\ 0 \end{pmatrix} \quad \text{Gitterpunkt des}$$

Ausgangsgitters ist. In diesen drei Fällen läßt sich die Matrix faktorisieren

$$\begin{pmatrix} p & q \\ q & -p \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} (p+q)/2 & -(q-p)/2 \\ -(q-p)/2 & (p+q)/2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} p & q \\ q & -p \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} p/2 & q/2 \\ q/2 & -p/2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 2 & 0 \\ 0 & 2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} p/2 & q/2 \\ q/2 & -p/2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & -1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ -1 & 1 \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} p & q \\ q & -p \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & -1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} p+q/2 & q-p/2 \\ q-p/2 & -p+q/2 \end{pmatrix}$$

Als Primtransformation verbleibt daher

$$\begin{pmatrix} 1 & -1 & 0 \\ 1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \text{ also die v-Transformation.}$$

Dabei ist zu bemerken, daß weitere Primtransformationen existieren, etwa die Matrix

$$\begin{pmatrix} 2 & -3 & 0 \\ 3 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (\det = 13), \text{ aber solche Transformationen können nur auf äquivalente Untergruppen führen.}$$

Analoge Betrachtungen gelten für die Matrix

$$\begin{pmatrix} p & -q & 0 \\ q & p & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

für inäquivalente Untergruppen muß wieder

$$\begin{pmatrix} p/2 \\ q/2 \\ 0 \end{pmatrix} \quad \text{oder} \quad \begin{pmatrix} q/2 \\ -p/2 \\ 0 \end{pmatrix} \quad \text{oder} \quad \begin{pmatrix} p-q/2 \\ q+p/2 \\ 0 \end{pmatrix} \quad \text{Gitterpunkt sein.}$$

Auch hier verbleibt wieder nur die v-Transformation. In beiden Fällen ist die pc-Transformation mit einer Primzahl p Primtransformation. Da die Kennstelle der vierzähligen Achse nur Werte 0, 1/4,

$1/2, 3/4$ annehmen kann und bei einer pc-Transformation Kennstellen-
 $\frac{t^3}{p}, \frac{t^3+1}{p}, \dots, \frac{t^3+p-1}{p}$ erzeugt werden. Um festzustellen,
 welche inäquivalenten Untergruppen dabei auftreten können, muß
 man nur die möglichen Fälle diskutieren:

$$t^{3'} = \frac{t^3+i}{p} = \frac{1}{4} \Leftrightarrow 4t^3+4i=p \quad \begin{array}{l} t^3=0 \Rightarrow p \text{ nicht prim} \\ t^3=1/4 \Rightarrow p=4i+1 \Rightarrow \text{äquivalent} \\ t^3=1/2 \Rightarrow p=2 \\ t^3=3/4 \Rightarrow p=4i+3 \end{array}$$

$\Rightarrow$ pc mit $p=4i+3$ vertauscht 4_1 und 4_3

$$t^{3'} = \frac{t^3+i}{p} = 1/2 \Leftrightarrow 2t^3+2i=p \quad \begin{array}{l} t^3=0 \Rightarrow p=2 \\ t^3=1/2 \Rightarrow p=2i+1 \Rightarrow \text{äquivalent} \end{array}$$

$$t^{3'} = \frac{t^3+i}{p} = 3/4 \Leftrightarrow 4t^3+4i=3p \quad \begin{array}{l} t^3=0 \Rightarrow 4i=3p \Rightarrow p \text{ nicht prim} \\ t^3=1/4 \Leftrightarrow 4i+1=3p \Leftrightarrow 3i+i+1=3p \\ \Leftrightarrow i+1=3x \Rightarrow p=3x-1+x=4x-1 \\ = 4y+3 \\ t^3=1/2 \Rightarrow p=2 \\ t^3=3/4 \Rightarrow t^3=t^{3'} \text{ äquivalent} \end{array}$$

$\Rightarrow$ pc mit $p=4i+3$ vertauscht 4_1 und 4_3 .

Als (P,P) Primtransformationen verbleiben also in der Kristall-
 klasse $\bar{4}$ keine, da nur äquivalente P-Untergruppen vorhanden sind,
 in der Kristallklasse 4 die Transformationen pc mit $p=4i+3$ und
 in der Kristallklasse $4/m$ die Transformationen pc mit $p=4i+3$
 und v.

Die Matrizen von $t\tau(P, I)_1$ lassen sich in der folgenden Form faktorisieren:

$$\begin{pmatrix} 2p & 2q & 0 \\ 2q & -2p & 0 \\ 0 & 0 & 2t \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} p & q & 0 \\ q & -p & 0 \\ 0 & 0 & t \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 1 & 0 \\ -1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & -1 & 0 \\ 1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 2 \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} 2p+1 & 2q+1 & 0 \\ 2q+1 & -(2p+1) & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & t \end{pmatrix} \begin{pmatrix} p-q & p+q+1 & 0 \\ n+q+1 & q-p & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & -1 & 0 \\ 1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 2 \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} 2p & -2q & 0 \\ 2q & 2p & 0 \\ 0 & 0 & 2t \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} p & -q & 0 \\ q & p & 0 \\ 0 & 0 & t \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 1 & 0 \\ -1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & -1 & 0 \\ 1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 2 \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} 2p+1 & -(2q+1) & 0 \\ 2q+1 & 2p+1 & 0 \\ 0 & 0 & 2t \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & t \end{pmatrix} \begin{pmatrix} p+q+1 & p-q & 0 \\ q-p & p+q+1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & -1 & 0 \\ 1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 2 \end{pmatrix}$$

Als Primtransformation verbleibt also nur

$$\begin{pmatrix} 1 & -1 & 0 \\ 1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 2 \end{pmatrix}, \text{ die mit } v_c \text{ bezeichnet wird.}$$

In $t\tau(I, P)_1$ ist die Einheitsmatrix Primtransformation.

In $t\tau(I, I)$ ist nur $(2p+1)c$ Primtransformation, falls $2p+1$

Primzahl ist. Da aber in I-Raumgruppen 4_1 - und 4_3 -Achsen stets paarweise auftreten, ergeben sich nur äquivalente Untergruppen.

Eine weitere Reduktionsmöglichkeit ergibt sich aus der Punktgruppen-

relation $4_z m_z = m_z 4_z$ in $4/m$. Es ist $4_z m_z 4_z^3 m_z = 1$ und daher

$$(4_z, T_4)(m_z, T_m)(4_z, T_4)^3(m_z, T_m) = (1, G)$$

$$\Rightarrow (1, (\bar{4}_z + \bar{1} + \bar{4}_z^3 + 1)T_4 + (m_z + 4_z)T_m) = (1, G)$$

$$\Rightarrow (t_m^1 - t_m^2, t_m^1 + t_m^2, 2t_4^3) = G$$

$\Rightarrow$ In P-Raumgruppen der Kristallklasse $4/m$ können keine 4_1 - und 4_3 -Achsen auftreten, außerdem folgt, daß a_z nur in I-Raumgruppen zusammen mit einer 4_1 -(bzw. 4_3) Achse auftreten kann.

Die reduzierten Transformationsgraphen haben also die Gestalt

$$\bar{4}: P \xrightarrow[\text{vc}]{e} I$$

$$4: \begin{array}{c} c \\ \text{pc} \end{array} \begin{array}{c} \circlearrowleft \\ \circlearrowright \end{array} P \xrightarrow[\text{vc}]{e} I$$

$p=4i+3$

$$\frac{4}{m}: \begin{array}{c} c \\ v \end{array} \begin{array}{c} \circlearrowleft \\ \circlearrowright \end{array} P \xrightarrow[\text{vc}]{e} I$$

Für $t \in (P, P)_2$ vereinfachen sich die Betrachtungen, da zweite und dritte Blickrichtung besetzt sind. Von den erzeugenden Matrizen brauchen nur

$$\begin{pmatrix} p & 0 & 0 \\ 0 & p & 0 \\ 0 & 0 & t \end{pmatrix} \quad \text{und} \quad \begin{pmatrix} p & -p & 0 \\ p & p & 0 \\ 0 & 0 & t \end{pmatrix} \quad \text{betrachtet}$$

zu werden, da

$$\begin{pmatrix} 0 & -p & 0 \\ p & 0 & 0 \\ 0 & 0 & t \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} p & 0 & 0 \\ 0 & p & 0 \\ 0 & 0 & t \end{pmatrix}$$

sich von

$$\begin{pmatrix} p & 0 & 0 \\ 0 & p & 0 \\ 0 & 0 & t \end{pmatrix}$$

nur um eine Basistransformation unterscheidet, bei der Achsen einer Blickrichtung vertauscht werden.

Die Kennstellenvektoren der Symmetrieelemente zweiter und dritter Blickrichtung sind

$$\tau_K(z_x) = (t^1 0 0)$$

$$\tau_K(z_y) = (0 t^2 0)$$

$$\tau_K(z_{xy}) = \left(-\frac{t^1+t^2}{2}, -\frac{t^1+t^2}{2}, 0\right)$$

$$\tau_K(z_{x\bar{y}}) = \left(-\frac{t^1-t^2}{2}, -\frac{t^2-t^1}{2}, 0\right)$$

$$\tau_K(m_x) = (0 t^2 t^3)$$

$$\tau_K(m_y) = (t^1 0 t^3)$$

$$\tau_K(m_{xy}) = \left(-\frac{t^1-t^2}{2}, -\frac{t^2-t^1}{2}, t^3\right)$$

$$\tau_K(m_{x\bar{y}}) = \left(-\frac{t^1+t^2}{2}, -\frac{t^1+t^2}{2}, t^3\right)$$

Daraus ergibt sich wegen $2\tau_K = G$, daß nur m_{xy} und $m_{x\bar{y}}$ in I-Gruppen Kennstellen 1/4 bzw. 3/4 besitzen und damit d-Gleitspiegelebenen definieren können alle anderen t^i können nur Werte 0 und 1/2 annehmen.

Deshalb führt die Transformation

$$\begin{pmatrix} p & 0 & 0 \\ 0 & p & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad \text{nur im Fall } p=2 \text{ auf inäquivalente Untergruppen.}$$

Aber

$$\begin{pmatrix} 2 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & -1 & 0 \\ 1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & -1 & 0 \\ 1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

also ist diese Transformation nicht prim.

Für die Transformation t_c gelten die gleichen Bedingungen wie oben: in Kristallklassen mit Inversionszentrum kommt nur c in Frage. In Drehgruppen führen auch $(4p+3)c$ -Transformationen auf inäquivalente Untergruppen.

$$\begin{pmatrix} p & -p & 0 \\ p & p & 0 \\ 0 & 0 & t \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & -1 & 0 \\ 1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} p & 0 & 0 \\ 0 & p & 0 \\ 0 & 0 & t \end{pmatrix}$$

Eine solche Transformation kann nur dann prim sein, wenn $|p|=|t|=1$ ist. Also verbleibt die v -Transformation, die wegen $\det(v)=2$ prim ist.

Für $t \in (P, P)_2$ verbleiben also nur die Transformationen c , $(4p+3)c$ in Drehgruppen, und v .

$t \in (P, I)_2$ enthält die Matrizentypen

$$\begin{pmatrix} 2p & 0 & 0 \\ 0 & 2p & 0 \\ 0 & 0 & 2t \end{pmatrix} \quad \text{und} \quad \begin{pmatrix} 0 & -2p & 0 \\ 2p & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 2t \end{pmatrix},$$

sowie

$$\begin{pmatrix} p & -p & 0 \\ p & -p & 0 \\ 0 & 0 & 2t \end{pmatrix}$$

Die beiden ersten stimmen bis auf eine Basistransformation überein und für die erste Matrix gilt:

$$\begin{pmatrix} 2p & 0 & 0 \\ 0 & 2p & 0 \\ 0 & 0 & 2t \end{pmatrix} = \underbrace{\begin{pmatrix} 1 & 1 & 0 \\ -1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}}_{t \tau(P,P)_2} \cdot \underbrace{\begin{pmatrix} p & -p & 0 \\ p & p & 0 \\ 0 & 0 & 2t \end{pmatrix}}_{t \tau(P,I)_2}$$

Man muß daher nur die Faktorisierbarkeit von

$$\begin{pmatrix} p & -p & 0 \\ p & p & 0 \\ 0 & 0 & 2t \end{pmatrix}$$

untersuchen.

Es ist

$$\begin{pmatrix} p & -p & 0 \\ p & p & 0 \\ 0 & 0 & 2t \end{pmatrix} = \underbrace{\begin{pmatrix} p & 0 & 0 \\ 0 & p & 0 \\ 0 & 0 & t \end{pmatrix}}_{(P,P)} \underbrace{\begin{pmatrix} 1 & -1 & 0 \\ 1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 2 \end{pmatrix}}_{(P,I)}$$

Der zweite Faktor wäre in $t \tau(P,P)_2$ zerlegbar. In $t \tau(P,I)_2$ ist er aber prim und einziger Primfaktor v.c.

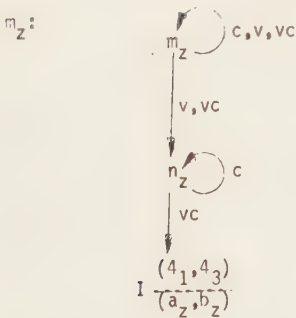
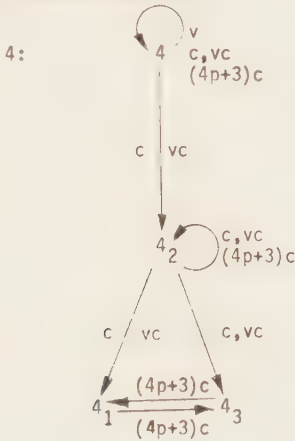
$t \tau(I,P)_2$ enthält nur die Dezentrierung als Primtransformation.

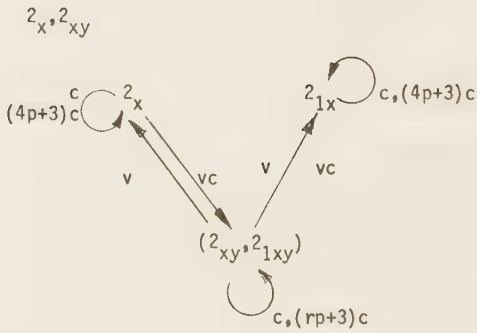
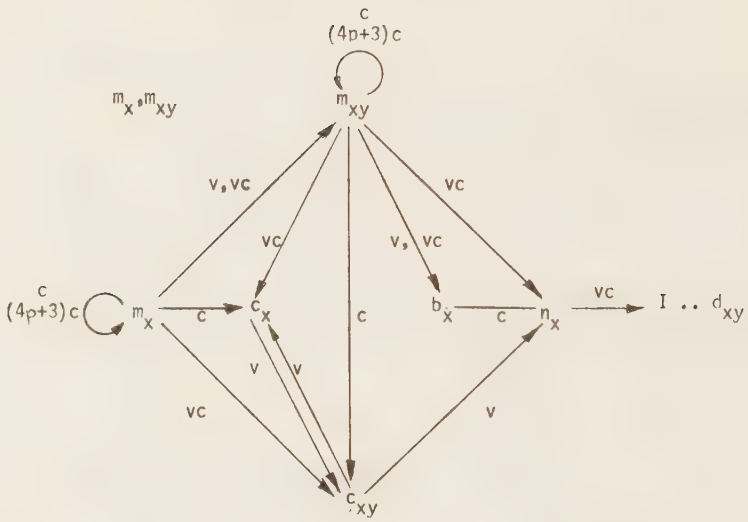
Die Matrizen von $\tau(I, I)_2$ entfallen aufgrund der gleichen Argumentation wie bei $\tau(I, I)_1$.

Es verbleibt daher der reduzierte Transformationsgraph



Die erzeugenden Symmetrieelemente mit $T_K \neq 0$ transformieren sich gemäß folgenden Graphen:





Daraus erhält man die folgenden tetragonalen Tabellen:

	vc	e
$P\bar{4}$	$I\bar{4}$	-
$I\bar{4}$	-	$P\bar{4}, P\bar{4}$

	c	$(4p+3)c$	vc	e
$P4$	$P4_2$	-	$I(4, 4_2)$	-
$P4_2$	$P4_1, P4_3$	-	$I(4_1, 4_3)$	-
$I(4, 4_2)$	-	-	-	$P4, P4_2$
$P4_1$	-	$P4_3$	-	-
$P4_3$	-	$P4_1$	-	-
$I(4_1, 4_3)$	-	-	-	$P4_1, P4_3$

	c	v	vc	e
$P\frac{4}{m}$	$P\frac{4_2}{m}$	$P\frac{4}{n}$	$I\frac{(4, 4_2)}{(m, n)}$	-
$P\frac{4_2}{m}$	-	$P\frac{4_2}{n}$	-	-
$P\frac{4}{n}$	$P\frac{4_2}{n}$	-	-	-
$I\frac{(4, 4_2)}{(m, n)}$	-	-	-	$P\frac{4}{m}, P\frac{4_2}{m}, P\frac{4}{n}, P\frac{4_2}{n}$
$P\frac{4_2}{n}$	-	-	$I\frac{(4_1, 4_3)}{(a, b)}$	-
$I\frac{(4_1, 4_3)}{(a, b)}$	-	-	-	-

	c	(4p+3)c	v	vc	e
$P4_{22}$	$P4_{22}$	-	$P4_{21}^2$	$I(4,4_2)(2,2_1)(2,2_1)$	
$P4_{22}$	$P4_{12}, P4_{32}$	-	$P4_{21}^2$	$I(4_1,4_3)(2,2_1)(2,2_1)$	
$P4_{21}$	$P4_{21}^2$	-	-	-	
$I(4,4_2)(2,2_1)(2,2_1)$	-	-	-	-	$P4_{22}, P4_{21}$
$P4_{21}^2$	$P4_{12}, P4_{31}^2$	-	-	-	$P4_{22}, P4_{21}^2$
$P4_{12}$	-	$P4_{32}$	$P4_{12}$	-	-
$P4_{32}$	-	$P4_{12}$	$P4_{31}^2$	-	-
$P4_{12}$	-	$P4_{31}^2$	-	-	-
$P4_{31}^2$	-	$P4_{12}$	-	-	-
$I(4_1,4_3)(2,2_1)(2,2_1)$	-	-	-	-	$P4_{12}, P4_{12}^2,$ $P4_{32}, P4_{31}^2$

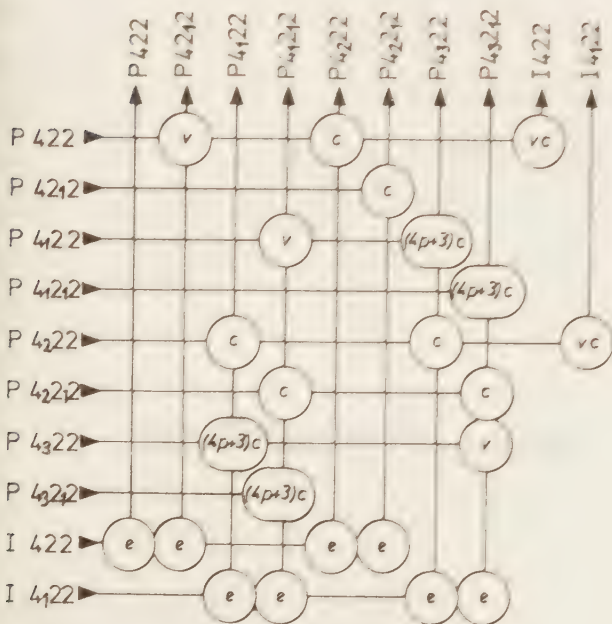
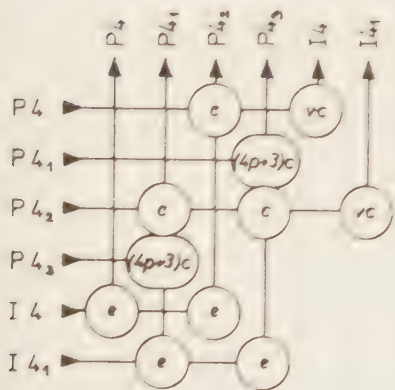
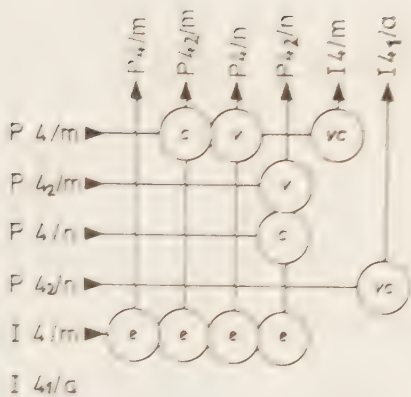
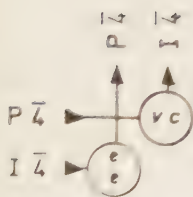
	c	v	vc	e
$P4_{nm}$	$P4_{2mc}, P4_{2cm}$ $P4_{cc}$	$P4_{bm}$	$I(4,4_2)(m,n)(mbnc)$ $I(4,4_2)(c,b)(mbnc)$	-
$P4_{2mc}$	-	$P4_{2cm}, P4_{2nm}$	-	-
$P4_{2cm}$	-	$P4_{2mc}, P4_{2bc}$	-	-
$P4_{cc}$	-	$P4_{nc}$	-	-
$P4_{bm}$	$P4_{2nm}, P4_{2bc}$ $P4_{mc}$	-	-	-

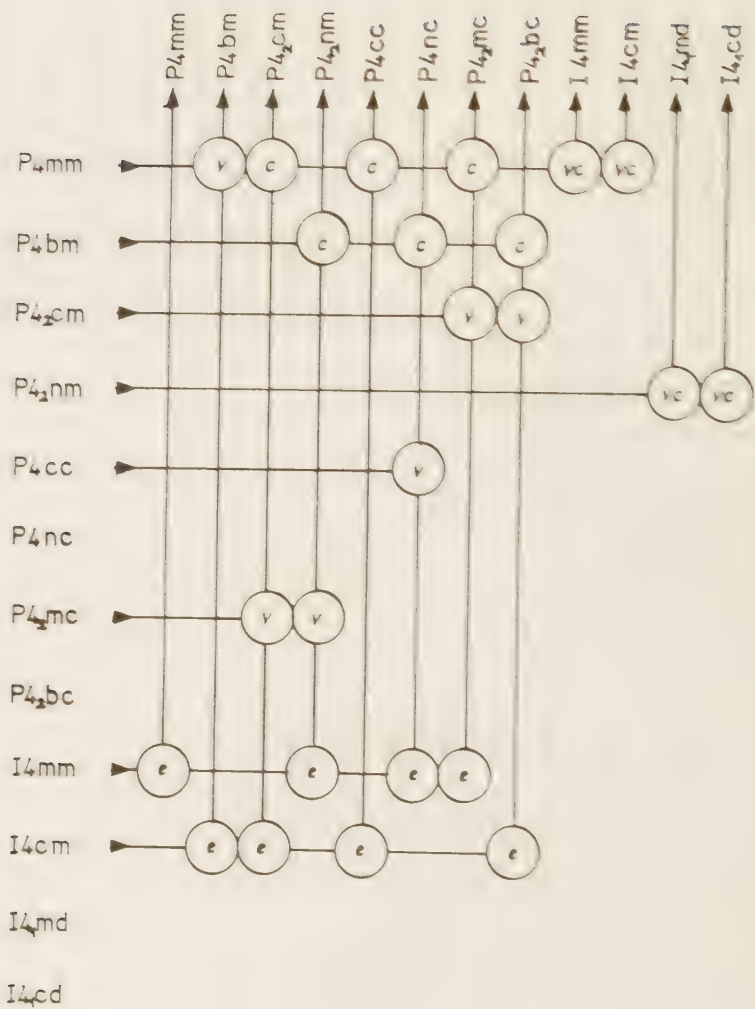
$I(4,4_2)(m,n)(m,b,nc)$	-	-		$P4nm, P4_2nc$ $P4_2nm, P4nc$
$I(4,4_2)(c,b)(mbnc)$	-	-		$P4_2cm, P4cc$ $P4_2m, P4_2bc$
$P4_2nm$	-	-	$I(4_1,4_3)(m,n)(d)$ $I(4_1,4_3)(c,b)(d)$	-
$P4_2bc$	-	-	-	-
$P4nc$	-	-	-	-
$I(4_1,4_3)(m,n)(d)$	-	-	-	-
$I(4_1,4_3)(c,b)(d)$	-	-	-	-

	C	V	VC	E
$P\bar{A}2m$	$P\bar{A}2c$	$P\bar{A}m2, P\bar{A}b2$	$I\bar{A}(m,n)(?,2_1)I\bar{A}(c,b)(2,2_1)$	-
$P\bar{A}2c$	-	$P\bar{A}c2, P\bar{A}n2$		-
$P\bar{A}m2$	$P\bar{A}c2$	$P\bar{A}2m, P\bar{A}2_1m$	$I\bar{A}(2,2_1)(nbnc)$	-
$P\bar{A}b2$	$P\bar{A}n2$	-	-	-
$I\bar{A}m2$	-	-	-	$P\bar{A}m2, P\bar{A}n2$
$I\bar{A}c2$	-	-	-	$P\bar{A}c2, P\bar{A}b2$
$P\bar{A}c2$	-	$P\bar{A}2c, P\bar{A}2_1c$	-	-
$P\bar{A}n2$	-	-	$I\bar{A}(2,2_1)d$	-
$P\bar{A}2_1m$	$P\bar{A}2_1c$	-	-	-
$I\bar{A}(2,2_1)(mbnc)$	-	-	-	$P\bar{A}2m, P\bar{A}2c$ $P\bar{A}2_1m, P\bar{A}2_1c$
$P\bar{A}2_1c$	-	-	-	-
$I\bar{A}(2,2_1)(d)$	-	-	-	-

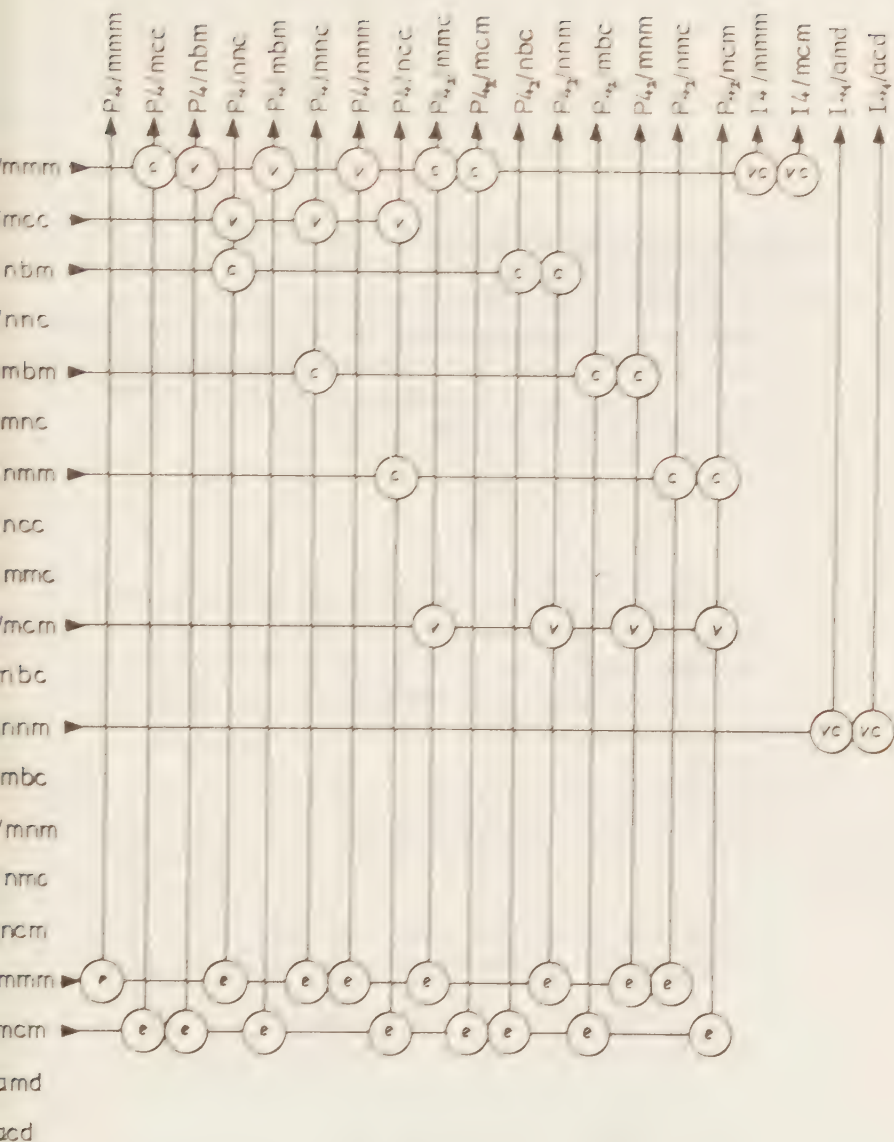
	c	v	vc	e
P_{mnm}^4	P_{m2mc}^4, P_{m2cm}^4	P_{n2cm}^4, P_{n2nm}^4	$I_{(m,n)}^{(4,4_2)}(m,n)$	-
	P_{mcc}^4	P_{ncc}^4	$I_{(m,n)}^{(4,4_2)}(c,b)(mbnc)$	
P_{m2mc}^4	-	P_{m2cm}^4, P_{m2nm}^4	-	-
		P_{n2cm}^4, P_{n2nm}^4		
P_{m2cm}^4	-	P_{m2mc}^4, P_{m2cc}^4	-	-
		P_{n2mc}^4, P_{n2cc}^4		
P_{mcc}^4	-	P_{mnc}^4, P_{ncc}^4	-	-
		P_{nnc}^4		
P_{mbm}^4	P_{m2nm}^4, P_{m2bc}^4	-	-	-
	P_{mnc}^4			
P_{nmm}^4	P_{n2mc}^4, P_{n2cm}^4	-	-	-
	P_{ncc}^4			
P_{nbm}^4	P_{n2nm}^4, P_{n2bc}^4	-	-	-
	P_{nnc}^4			
$I_{(m,n)}^{(4,4_2)}(m,n)(m,n,bc)$	-	-	-	P_{mnm}^4, P_{nmm}^4
				P_{m2nm}^4, P_{n2nm}^4
				P_{m2mc}^4, P_{n2mc}^4
				P_{m2cc}^4, P_{n2cc}^4

$I_{(m,n)}^{(4,4_2)}(c,a)(m,r,b,c)$	-	-	-	$p_{m,c}^{4_2}, p_{n,c}^{4_2}m$
				$p_{m,b}^{4_2}, p_{n,b}^{4_2}m$
				$p_{m,c}^{4_2}c, p_{n,c}^{4_2}cc$
				$p_{m,b}^{4_2}c, p_{n,b}^{4_2}bc$
$p_{m,n}^{4_2}$	-	-	-	-
$p_{n,m}^{4_2}$	-	-	-	-
$p_{n,m}^{4_2}$	-	-	$I_{(a,b)}^{(4_1,4_3)}(m,n)(d)$	-
			$I_{(a,b)}^{(4_1,4_3)}(c,b)(d)$	-
$p_{m,c}^{4_2}$	-	-	-	-
$p_{n,c}^{4_2}$	-	-	-	-
$p_{n,c}^{4_2}$	-	-	-	-
$p_{m,n}^{4_2}$	-	-	-	-
$p_{n,c}^{4_2}$	-	-	-	-
$p_{n,c}^{4_2}$	-	-	-	-
$I_{(a,b)}^{(4_1,4_3)}(r,n)(d)$	-	-	-	-
$I_{(a,b)}^{(4_1,4_3)}(c,b)(d)$	-	-	-	-





Adjazenzmatrix von 4mm



Adjazenzmatrix von $4/mmm$

7.5. Rhomboedrisch-hexagonale Kristallfamilie

(a) Die Transformationshalbgruppe $rh\tau$

Aufgrund der engen Kopplung zwischen rhomboedrischem und hexagonalem Gitter, soll im folgenden stets die Beschreibung von der hexagonalen Basis aus erfolgen. In der Systemgruppe stehen also die Drehmatrizen und die Matrizen der Form

$$\begin{pmatrix} x & 0 & 0 \\ 0 & x & 0 \\ 0 & 0 & z \end{pmatrix}$$

zur Verfügung. Es gibt in dieser Kristallfamilie nur die BRAVAIS-Gitter P und R. Für die hexagonalen Kristallklassen gibt es nur das BRAVAIS-Gitter P, was die Betrachtung weiter vereinfacht. Es existiert stets die ausgezeichnete Richtung $\nearrow$, die auf sich abgebildet werden muß; deshalb kommen für $rh\tau(P,P)$ nur Matrizen der Form

$$\begin{pmatrix} p & r & 0 \\ q & s & 0 \\ 0 & 0 & t \end{pmatrix}$$

in Frage, wobei das hexagonale Koordinatensystem erhalten bleiben muß, was zur Folge hat, daß die Matrix die folgende Form annimmt:

$$\begin{pmatrix} p & -q & 0 \\ q & p-q & 0 \\ 0 & 0 & t \end{pmatrix} \quad \text{bzw.} \quad \begin{pmatrix} p & q-p & 0 \\ q & -p & 0 \\ 0 & 0 & t \end{pmatrix}$$

wobei die Determinante positiv sein soll.

In den Kristallklassen, in denen nicht nur die erste Blickrichtung besetzt ist ergeben sich als weitere Einschränkungen die Bedingungen, daß als Drehungen nur Vielfache von 30° möglich sind, damit gleichberechtigte Richtungen aufeinander abgebildet werden. Es verbleiben dann die Matrizen

$$\begin{pmatrix} 2p & -p & 0 \\ p & p & 0 \\ 0 & 0 & t \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} p & -p & 0 \\ p & 0 & 0 \\ 0 & 0 & t \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 & -p & 0 \\ p & -p & 0 \\ 0 & 0 & t \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} -p & -p & 0 \\ p & -2p & 0 \\ 0 & 0 & t \end{pmatrix},$$

$$\begin{pmatrix} -p & 0 & 0 \\ 0 & -p & 0 \\ 0 & 0 & t \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} -2p & p & 0 \\ -p & -p & 0 \\ 0 & 0 & t \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} -p & p & 0 \\ -p & 0 & 0 \\ 0 & 0 & t \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} p & -2p & 0 \\ 2p & -p & 0 \\ 0 & 0 & t \end{pmatrix},$$

$$\begin{pmatrix} -p & 2p & 0 \\ -2p & p & 0 \\ 0 & 0 & t \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 & p & 0 \\ -p & p & 0 \\ 0 & 0 & t \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} p & p & 0 \\ -p & 2p & 0 \\ 0 & 0 & t \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} p & 0 & 0 \\ 0 & p & 0 \\ 0 & 0 & t \end{pmatrix}$$

und die entsprechenden mit umgekehrtem Drehsinn und negativem t . Jeweils sechs dieser Matrizen bilden eine Blickrichtung auf sich ab, weshalb man nur je eine davon als erzeugende Operation berücksichtigen muß:

$$\begin{pmatrix} p & 0 & 0 \\ 0 & p & 0 \\ 0 & 0 & t \end{pmatrix} \quad \text{und} \quad \begin{pmatrix} 2p & -p & 0 \\ p & p & 0 \\ 0 & 0 & t \end{pmatrix}$$

Die Operation

$$\begin{pmatrix} 2 & -1 & 0 \\ 1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

wird hier als v-Transformation bezeichnet.

Damit sind für beide Fälle die Transformationshalboruppen $rh\mathbb{K}(P,P)$ beschreiben.

Es sind noch die Teilmengen

$$rh\mathbb{K}(P,R), rh\mathbb{K}(R,R) \text{ und } rh\mathbb{K}(R,P)$$

zu untersuchen.

Für den Matrizentyp

$$\begin{pmatrix} p & -q & 0 \\ q & p-q & 0 \\ 0 & 0 & t \end{pmatrix}$$

errechnet man aus der Ganzzahligkeitsforderung für $rh\mathbb{K}(P,R)$ die Form

$$\begin{pmatrix} 3p'-q' & -q' & 0 \\ q' & 3p'-2q' & 0 \\ 0 & 0 & 3t' \end{pmatrix}$$

für den Typ

$$\begin{pmatrix} p & q-p & 0 \\ q & -p & 0 \\ 0 & 0 & t \end{pmatrix}$$

entsprechend:

$$\begin{pmatrix} 2p'-q' & -p'+2q' & 0 \\ p'+q' & -2p'+q' & 0 \\ 0 & 0 & 3t' \end{pmatrix}$$

Insbesondere bedeutet dies für

$$\begin{pmatrix} p & 0 & 0 \\ 0 & p & 0 \\ 0 & 0 & t \end{pmatrix}$$

die Form

$$\begin{pmatrix} 3p' & 0 & 0 \\ 0 & 3p' & 0 \\ 0 & 0 & 3t' \end{pmatrix}$$

und für

$$\begin{pmatrix} 2p & -p & 0 \\ p & p & 0 \\ 0 & 0 & t \end{pmatrix} \quad \text{die Form} \quad \begin{pmatrix} 2p & -p & 0 \\ p & p & 0 \\ 0 & 0 & 3t' \end{pmatrix}$$

Die Matrizen vom ersten Typ haben in $\text{rh}\tau(R, R)$ die Form

$$\begin{pmatrix} p' & -q' & 0 \\ q' & p'-q' & 0 \\ 0 & 0 & n'+q'+3t' \end{pmatrix}$$

und im Spezialfall

$$\begin{pmatrix} p' & 0 & 0 \\ 0 & p' & 0 \\ 0 & 0 & p'+3t' \end{pmatrix} \quad \text{bzw.} \quad \begin{pmatrix} 2p' & -p' & 0 \\ p' & p' & 0 \\ 0 & 0 & 3p'+3t' \end{pmatrix}$$

Die Matrizen vom zweiten Typ genügen der Form

$$\begin{pmatrix} p' & q'-p' & 0 \\ q' & -p' & 0 \\ 0 & 0 & -p'+2q'+3t' \end{pmatrix}$$

Für $\text{rh}\tau(R, P)$ ergibt sich schließlich, daß alle Matrizen von $\text{rh}\tau(P, P)$ zulässig sind und zusätzlich die Einheitsmatrix Untergruppentransformation ist.

(b) Primtransformationen

Auch hier sollen wieder nur diejenigen Matrizen faktorisiert werden, die tatsächlich als inäquivalente Untergruppentransformationen auftreten können. Deshalb werden zunächst die Kennstellenvektoren der möglichen erzeugenden Operationen aufgeschrieben.

Ist $T = (t^1, t^2, t^3)$, so ist

$$T_K(3_z) = (0 \ 0 \ t^3)$$

$$T_K(\bar{3}) = (0 \ 0 \ 0)$$

$$T_K(2_{xy}) = \left(\frac{t^1+t^2}{2}, \frac{t^1+t^2}{2}, 0 \right)$$

$$T_K(2_{2xy}) = (t^1, t^1_2, 0)$$

$$T_K(m_{xy}) = \left(\frac{t^1-t^2}{2}, \frac{t^2-t^1}{2}, t^3 \right)$$

$$T_K(m_{2xy}) = \left(0, \frac{2t^2-t^1}{2}, t^3 \right)$$

$$T_K(6_z) = (0, 0, t^3)$$

$$T_K(\bar{6}_z) = (0 \ 0 \ 0)$$

$$T_K(m_z) = (t^1 \ t^2 \ 0).$$

In der Kristallklasse $\bar{3}$ kann nur eine (P,R)- und eine (R,P)-Transformation auf inäquivalente Untergruppen führen. Es gilt folgende Faktorisierung

$$\begin{pmatrix} 3p'-q' & -q' & 0 \\ q' & 3p'-2q' & 0 \\ 0 & 0 & 3t' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} p' & p'-q' & 0 \\ q'-p' & 2p'-q' & 0 \\ 0 & 0 & t' \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 2 & -1 & 0 \\ 1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 3 \end{pmatrix}$$

Der erste Faktor ist eine (P,P)-Transformation und muß bei maximaler Transformation die Determinante ± 1 besitzen. Der zweite Faktor ist in $\text{rh}\mathbb{C}(P,R)$ unzerlegbar.

Analog gilt:

$$\begin{pmatrix} 2p' - q' & -p' + 2q' & 0 \\ p' + q' & -2p' + q' & 0 \\ 0 & 0 & 3t' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} p' & -q' & 0 \\ q' & p' - q' & 0 \\ 0 & 0 & -t' \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 2 & -1 & 0 \\ 1 & -2 & 0 \\ 0 & 0 & -3 \end{pmatrix}$$

Die beiden nicht-faktorisierbaren Transformationen transformieren die Blickrichtungen in gleicher Weise. Deshalb braucht nur eine der Transformationen berücksichtigt zu werden. Die Transformation

$$\begin{pmatrix} 2 & -1 & 0 \\ 1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 3 \end{pmatrix}$$

wird als v3c-Transformation bezeichnet. Als prime (R,P)-Transformation kommt nur die Dezentrierung e in Frage. Der zu $\bar{3}$ gehörige Graph hat daher die Gestalt

$$\begin{array}{ccc} & e & \\ P & \xleftarrow{\quad} & P \\ & v3c & \end{array}$$

In der Kristallklasse 3 sind wegen $T_K(3_2) = (0 \ 0 \ t^3)$ mit $t^3 = 0, 1/3, 2/3$ weitere Transformationen möglich. Von den (P,P)-Transformationen kommen diejenigen in Frage, die die Form t_c besitzen. Sie können wie in der tetragonalen Kristallfamilie nach dem Faktor t klassifiziert werden. Unter t_c geht eine Kennstelle t^3 über in

$$t^{3'} = \frac{t^3 + n}{t},$$

wobei $n=0, \dots, t-1$ durchläuft und t eine Primzahl ist. Es sind die folgenden Fälle möglich:

Für die Kristallklasse 6 kommen wegen $T_K(6) = (00t^3) \ t^3=0,1/6,1/3,1/2, 2/3, 5/6$ nur Transformationen tc in Frage. Eine analoge Betrachtung wie bei der dreizähligen Achse liefert

für $t^3 = 0, \ t^{3'} = \frac{n}{t}$ die Transformationen c und $3c$

für $t^3 = \frac{1}{6}, \ t^{3'} = \frac{1+6n}{6t}$ die Transformation $(6n+5)c$
für $t_3^1 = \frac{5}{6}$

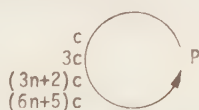
für $t^3 = \frac{1}{3}, \ t^{3'} = \frac{1+3n}{3t}$ die Transformationen c bei $t^{3'} = \frac{1}{6}$ und $(3n+2)c$ bei $t^{3'} = \frac{2}{3}$

für $t^3 = \frac{1}{2}, \ t^{3'} = \frac{1+2n}{2t}$ die Transformation $3c$ bei $t^{3'} = \frac{1}{6}$ und $t^{3'} = \frac{5}{6}$

für $t^3 = \frac{2}{3}, \ t^{3'} = \frac{2+3n}{3t}$ die Transformation c bei $t^{3'} = \frac{5}{6}$ und $(3n+2)c$ bei $t^{3'} = \frac{1}{3}$

für $t^3 = \frac{5}{6}, \ t^{3'} = \frac{5+6n}{6t}$ die Transformation $(6n+5)c$ für $t_3^1 = \frac{5}{6}$.

Daraus ergibt sich der Graph



Für die Kristallklasse 6/m erhält man aus der Gruppenrelation $6_2 m_2 6_2^5 m_2 = 1$ eine einschränkende Bedingung:

$$\text{so } T(\pi) = \begin{pmatrix} t_{\pi}^1 & t_{\pi}^2 & t_{\pi}^3 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

$$\text{und } T(\delta) = \begin{pmatrix} t_{\delta}^1 & t_{\delta}^2 & t_{\delta}^3 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

so gilt

$$2t_{\pi}^1 + t_{\pi}^2, t_{\pi}^1 + t_{\pi}^2, -4t_{\pi}^3,$$

muß Gittervektor sein.

Das bedeutet, daß t_{π}^3 nur die Werte 0 und 1/2 annehmen kann, also nur δ_1 - und δ_2 -Achsen möglich sind. Außerdem folgt, daß t_{π}^1 und t_{π}^2 ganzzahlig sein müssen, also nur Spiegelebenen π_2 auftreten können. Man erhält als Graphen für $6/m$ daher



In der Kristallklasse 32 können nur tc -Transformationen und v -Transformationen auf äquivalente P -Gruppen führen, da δ_1 - und δ_2 -Achsen stets gekoppelt auftreten und nur die Lage in der zweiten und dritten Blickrichtung vertauscht werden kann.

Die (P,R) -Transformation

$$\begin{pmatrix} 3p' & 0 & 0 \\ 0 & 3p' & 0 \\ 0 & 0 & 3t' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 0 \\ -1 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 2p' & -p' & 0 \\ p' & p' & 0 \\ 0 & 0 & 3t' \end{pmatrix}$$

wobei der erste Faktor eine (P,P) -Transformation ist; also kann nur der zweite Faktor maximal sein.

$$\begin{pmatrix} 2p' & -p' & 0 \\ p' & p' & 0 \\ 0 & 0 & 3t' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} p' & 0 & 0 \\ 0 & p' & 0 \\ 0 & 0 & t' \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 2 & -1 & 0 \\ 1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 3 \end{pmatrix}$$

wobei wieder der erste Faktor eine (P,P)-Transformation ist. Der zweite Faktor ist in $\text{rh}\tau(P,R)$ unzerlegbar, also tritt genau die $v3c$ -Transformation auf.

(R,R)-Transformationen können nur auf äquivalente Untergruppen führen, da $(3,3_1,3_2)$ und $(2,2_1)$ bei Transformation erhalten bleiben.

Von R nach P führt die Dezentrierung.

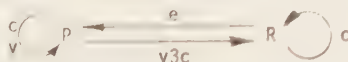
Für 32 erhält man daher den Graphen:



In R ist nur die zweite, nicht die dritte Blickrichtung besetzt. Deshalb kann eine R-Untergruppe nur aus einer P-Gruppe mit unbesetzter zweiter Blickrichtung gewonnen werden.

In $3m$ vereinfachen sich die Verhältnisse, da die Relation $3_2^m 3_2^m 3_2^m = 1$ zur Folge hat, daß die Kennstellen der erzeugenden dreizähligen Achse nur 0 sein können. Dafür transformiert sich m_{xy} unter c in c_{xy} .

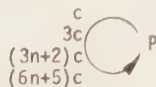
Es ist daher für $3m$



Derselbe Graph gilt für $\bar{3} 2/m$.

In den restlichen hexagonalen Gruppen gibt es nur ein BPAVAIS-Gitter P.

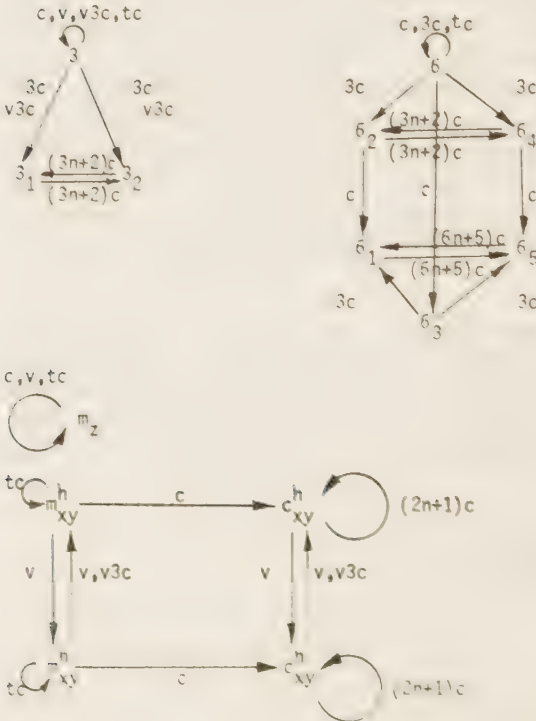
In 622 sind die 2. und 3. Blickrichtung identisch besetzt; deshalb entfällt die v -Transformation. Man erhält daher denselben Graphen wie für die Kristallklasse 6:

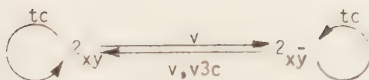


In 6_{xy} kann aufgrund der Gruppenrelation $6_z m_{xy} 6_{xy} = 1$ die Kennstelle von 6_z nur die Werte 0 und $1/2$ annehmen, weshalb nur 6_- und 6_3 -Achsen auftreten. Der Graph hat daher die Form



wobei die v -Transformation nur bei unterschiedlicher Besetzung der zweiten und dritten Blickrichtung auf inäquivalente Untergruppen führt. Derselbe Graph gilt für 6_{2m} und $\frac{6}{m}$. Die Transformationsgraphen der erzeugenden Symmetrieelemente sind:





Aufgrund dieser Sachverhalte gewinnt man die folgenden Untergrundentabellen:

	$v3c$	e
$P\bar{3}$	$R\bar{3}$	-
$R\bar{3}$	-	$P\bar{3}$

	$3c$	$(3n+2)c$	$v3c$	e
$P3$	$P3_1, P3_2$	-	$R3$	-
$P3_1$	-	$P3_2$	-	-
$P3_2$	-	$P3_1$	-	-
$R3$	-	-	$P3, P3_1, P3_2$	

	$3c$	$(3n+2)c$	v	$v3c$	e
$P32\ 1$	$P3_1\ 21, P3_2\ 21$	-	$P312$	-	-
$P3_1\ 21$	-	$P3_2\ 21$	$P3_1\ 12$	-	-
$P3_2\ 21$	-	$P3_1\ 21$	$P3_2\ 12$	-	-
$P312$	$P3_1\ 12, P3_2\ 12$	-	$P321$	$R32$	-
$P3_1\ 12$	-	$P3_2\ 12$	$P3_1\ 21$	-	-
$P3_2\ 12$	-	$P3_1\ 12$	$P3_2\ 21$	-	-
$R32$	-	-	-	-	$P321, P3_1\ 21, P3_2\ 21$

	c	v	v3c	e
$\mathcal{P}_{3n-1}$	$\mathcal{P}_{3c-1}$	$\mathcal{P}_{31n}$	-	-
$\mathcal{P}_{3c-1}$	-	$\mathcal{P}_{31c}$	-	-
$\mathcal{P}_{31n}$	$\mathcal{P}_{31c}$	$\mathcal{P}_{3n-1}$	$\mathcal{P}_{3n}$	-
$\mathcal{P}_{31c}$	-	$\mathcal{P}_{3c-1}$	$\mathcal{P}_{3c}$	-
$\mathcal{P}_{3n}$	$\mathcal{P}_{3c}$	-	-	$\mathcal{P}_{3n-1}$
$\mathcal{P}_{3c}$	-	-	-	$\mathcal{P}_{3c-1}$

	c	v	v3c	e
$\mathcal{P}_{\frac{3n-1}{3}c-1}$	$\mathcal{P}_{\frac{3c-1}{3}c-1}$	$\mathcal{P}_{\frac{3n}{3}c-1}$	-	-
$\mathcal{P}_{\frac{3c-1}{3}c-1}$	-	$\mathcal{P}_{\frac{3n}{3}c-1}$	-	-
$\mathcal{P}_{\frac{3n}{3}c-1}$	$\mathcal{P}_{\frac{3n-1}{3}c-1}$	$\mathcal{P}_{\frac{3n}{3}c-1}$	$\mathcal{P}_{\frac{3n}{3}c-1}$	-
$\mathcal{P}_{\frac{3n-1}{3}c-1}$	-	$\mathcal{P}_{\frac{3n}{3}c-1}$	$\mathcal{P}_{\frac{3n}{3}c-1}$	-
$\mathcal{P}_{\frac{3n}{3}c-1}$	$\mathcal{P}_{\frac{3n-1}{3}c-1}$	-	-	$\mathcal{P}_{\frac{3n-1}{3}c-1}$
$\mathcal{P}_{\frac{3n-1}{3}c-1}$	-	-	-	$\mathcal{P}_{\frac{3n-1}{3}c-1}$

$\mathcal{P}_{3n}$ besitzt keine klassenleiche inäquivalente Untergruppe

$\mathcal{P}_{3n}^*$

	c	3c	(3n+2)c	(6n+5)c
$\mathcal{P}_{3n}^*$	$\mathcal{P}_{3n}$	$\mathcal{P}_{3n}^*, \mathcal{P}_{3n-1}$	-	-
$\mathcal{P}_{3n-1}^*$	-	$\mathcal{P}_{3n}^*, \mathcal{P}_{3n-1}$	-	-
$\mathcal{P}_{3n-1}$	$\mathcal{P}_{3n}$	-	$\mathcal{P}_{3n-1}$	-
$\mathcal{P}_{3n-1}$	$\mathcal{P}_{3n-1}$	-	$\mathcal{P}_{3n-1}$	-
$\mathcal{P}_{3n-1}$	-	-	-	$\mathcal{P}_{3n-1}$
$\mathcal{P}_{3n-1}$	-	-	-	$\mathcal{P}_{3n-1}$

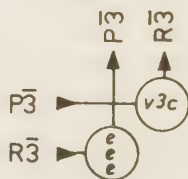
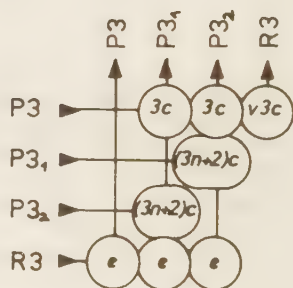
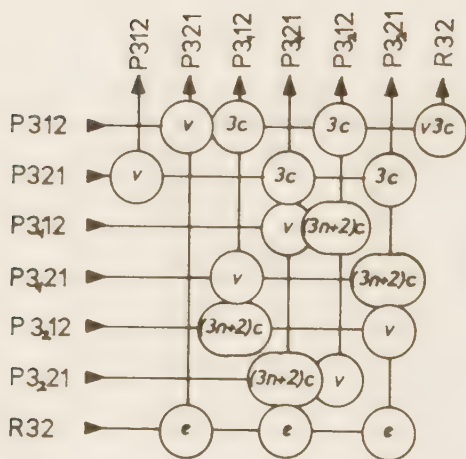
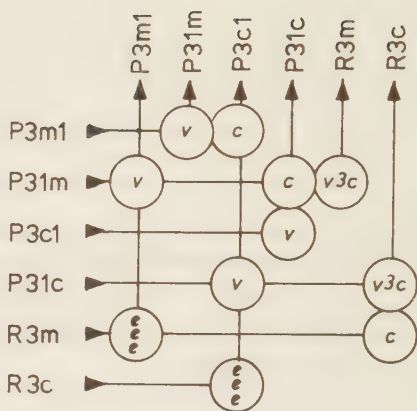
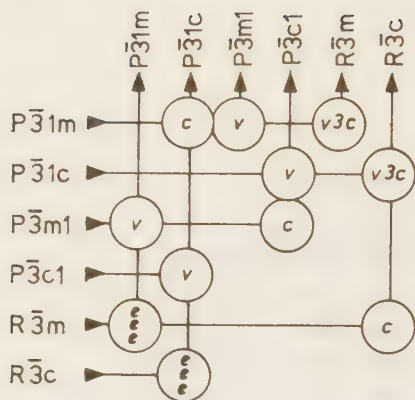
$\frac{P_1}{P_2}$	$\frac{P_3}{P_4}$
-	-

	c	3c	(3n+2)c	(6n+5)c
P622	P6 ₃ 22	P6 ₂ 22, P6 ₄ 22	-	-
P6 ₃ 22	-	P6 ₁ 22, P6 ₅ 22	-	-
P6 ₂ 22	P6 ₁ 22	-	P6 ₄ 22	-
P6 ₄ 22	P6 ₅ 22	-	P6 ₂ 22	-
P6 ₁ 22	-	-	-	P6 ₅ 22
P6 ₅ 22	-	-	-	P6 ₁ 22

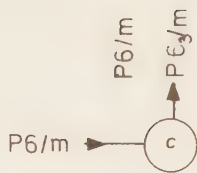
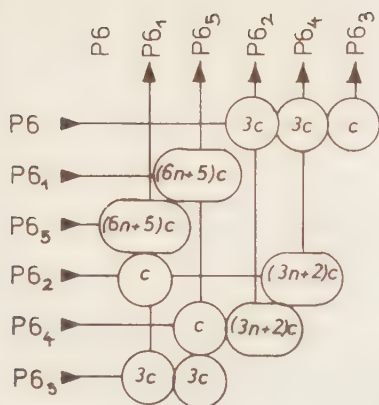
	c	v
P6mm	P6 ₃ mc, P6 ₃ cm, P6cc	-
P6 ₃ mc	-	P6 ₃ cm
P6 ₃ cm	-	P6 ₃ mc
P6cc	-	-

	c	v
P6 ₂ m	P6 ₂ c	P6 ₂ m
P6 ₂ c	-	P6 ₂ c
P6 ₂ m	P6 ₂ c	P6 ₂ m
P6 ₂ c	-	P6 ₂ c

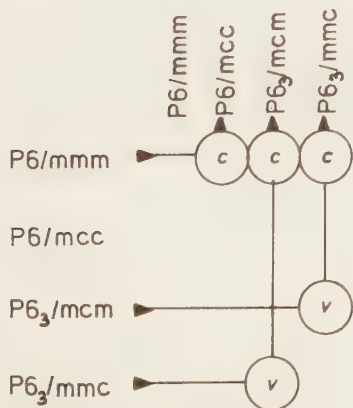
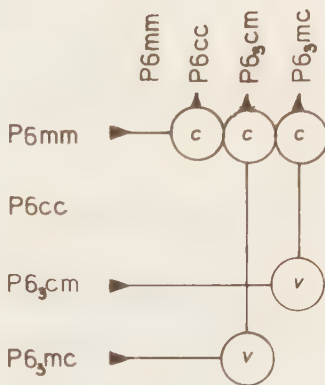
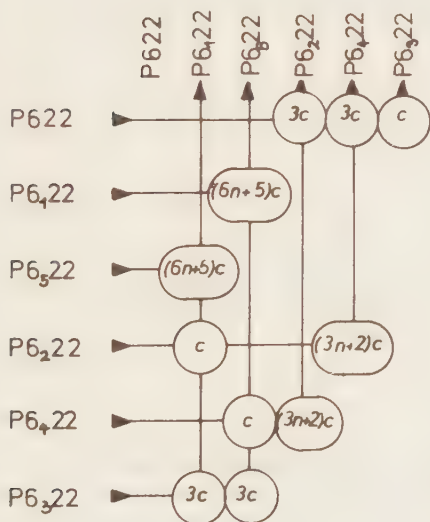
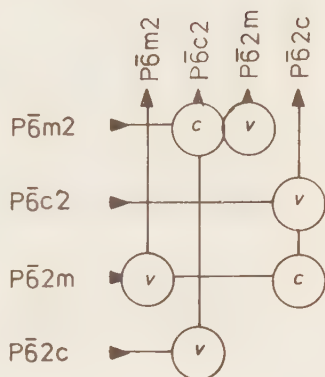
	$\frac{P_3}{P_m}$ mc, $\frac{P_3}{P_m}$ cm, $\frac{P_3}{P_m}$ cc
$\frac{P_3}{P_m}$ mm	
$\frac{P_3}{P_m}$ mc	-
$\frac{P_3}{P_m}$ cm	-
$\frac{P_3}{P_m}$ cc	-



Adjazenzmatrizen für $\bar{3}, 3, 32, 3m$ und $3m$



$P6_3/m$



Adjazenzmatrizen von
 $6, 6/m, \bar{6}m2, 622, 6mm, 6/mmm$

7.6. Kubische Kristallfamilie

(a) Die Transformationshalbgruppe $c\tau$

In der kubischen Systemgruppe stehen neben den Drehmatrizen nur die n -fachen Einheitsmatrizen zur Verfügung. Die Tatsache, daß die Blickrichtungen auf sich abgebildet werden müssen, läßt im kubischen System keine Drehmatrix außer Permutationsmatrizen zu. Die Permutationsmatrizen sind aber nur Basistransformationen in einer Raumgruppe. Deshalb besteht $c\tau(P,P)$ aus den Matrizen nE , mit der Einheitsmatrix E .

Im kubischen System existieren neben P die BRAVAIS-Gitter I und F . Für die Teilmenge ergibt sich

$$c\tau(P,I) = \{2nE\}$$

$$c\tau(P,F) = \{2nE\}$$

$$c\tau(I,P) = c\tau(P,P) + \text{Dezentrierung}$$

$$c\tau(F,P) = \quad "$$

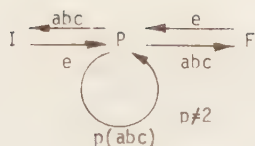
$$c\tau(I,F) = \{2nE\}$$

$$c\tau(F,I) = \{2nE\}$$

(b) Primtransformationen

Für $c\tau(P,P)$ ist die Faktorierbarkeit sofort entschieden nE ist genau dann nicht in $c\tau(P,P)$ faktorierbar, wenn n prim ist. $p(abc)$

Für $p=2$ ist abc faktorierbar in eine (P,I) - (I,P) -Transformation. In $c\tau(P,F)$ verbleibt als Primtransformation nur abc , ebenso in $c\tau(P,I)$. $c\tau(I,F)$ und $c\tau(F,I)$ enthalten keine Primtransformation, da die Dezentrierung e Primtransformation in $c\tau(I,P)$ und $c\tau(F,P)$ ist. Daraus erhält man:



(c) Reduktion der Primtransformationen

Im kubischen System existieren die Punktgruppen $23, \frac{2}{m}\bar{3}, 432, \bar{4}3m$ und $\frac{4}{m}\bar{3}\frac{2}{m}$. Die Kennstellenvektoren der erzeugenden Operationen sind

$$T_K(2_x) = (t^1 \ 0 \ 0)$$

$$T_K(3_{xxx}) = \left(\frac{t^1+t^2+t^3}{3}, \frac{t^1+t^2+t^3}{3}, \frac{t^1+t^2+t^3}{3} \right)^{-}$$

$$T_K(\bar{3}) = 0$$

$$T_K(4_x) = (t^1 \ 0 \ 0)$$

$$T_K(2_{xy}) = \left(\frac{t^1+t^2}{2}, \frac{t^1+t^2}{2}, 0 \right)$$

$$T_K(\bar{4}) = 0$$

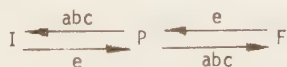
$$T_K(m_x) = (0 \ t^2 \ t^3)$$

$$T_K(m_{xy}) = \left(\frac{t-t^2}{2}, \frac{t^2-t^1}{2}, t^3 \right)$$

Die 3-zählige Achse liegt raumdiagonal und ist daher stets auch 3_1 - und 3_2 -Achse weshalb sie bei Untergruppentransformationen stets erhalten bleibt.

Die 2_x -Achse wird nur unter abc inäquivalent transformiert.

Für 23 ergibt sich daraus der reduzierte Graph:



Da nur unter der abc Transformation zulässige inäquivalente Kennstellen für m_x entstehen, besitzt $\frac{2}{m}3$ denselben reduzierten Graphen wie 23. Dabei ist zu beachten, daß m_x auch d_x werden kann, wenn eine F-Raumgruppe vorliegt. Dies entspricht den Betrachtungen für die orthorhombische Gruppe $\frac{222}{mmm}$.

In der Kristallklasse 432 sind wegen der vierzähligen Achse zusätzlich (P, P) -Transformationen möglich.

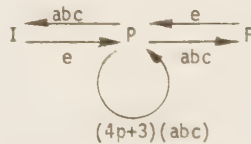
$$T_K(4_x) = (t^1, 0, 0)$$

Unter $p(abc)$, $p \geq 2$, p prim

transformiert sich t^1 in der Form:

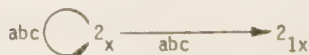
$$t^1 = \frac{t^1 + n}{p} \quad 0 \leq n \leq p-1$$

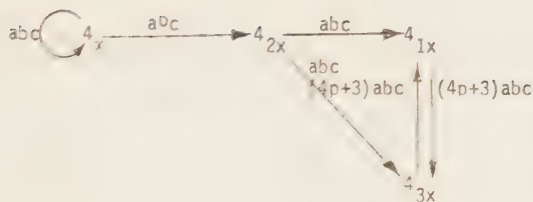
t^1 kann die Werte 0, $1/4$, $1/2$, $3/4$ annehmen. Daher transformieren $(4p+3)(abc)$ -Transformationen 4_1 -Achsen in 4_3 -Achsen und umgekehrt. Es ergibt sich der Graph



In der Kristallklasse $\bar{4}3m$ ist wiederum nur der Graph von 23 möglich. Für $\frac{4}{m}\bar{3}\frac{2}{m}$ gilt derselbe Graph, da in $\frac{4}{m}4_1$ nur in I- und F-Raumgruppen auftreten kann.

Für die Erzeugenden gelten die Graphen:





$$\begin{array}{c} \text{abc} \\ \curvearrowright \\ m_x \end{array} \xrightarrow{\text{abc}} b_x, c_x \quad \cong \quad I a..$$

abc

$$\downarrow \text{abc} \\ n_x \xrightarrow{\quad} F d_x$$

$$(n_{xj}, p_{xj}) \xrightarrow{\text{abc}} (n_{xj}, c_{xy}) \xrightarrow{\text{abc}} I .. d_{xy}$$

Man erhält daraus die folgenden Tabellen:

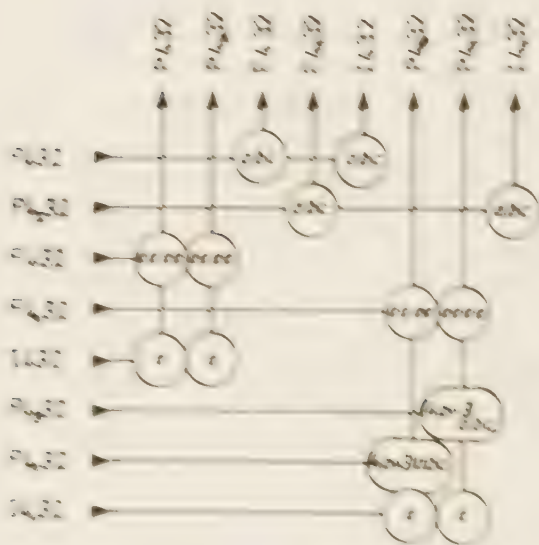
	abc	e
P23	I2 ₁ 3 I23, F23	-
I23	-	P23
F23	-	P23, P2 ₁ 3
P2 ₁ 3	-	-
I2 ₁ 3	-	P2 ₁ 3

	abc	e
$\frac{p_{\frac{2}{3}}^2}{\frac{2}{3}}$	$\frac{1_{\frac{2}{3}}^2}{\frac{2}{3}}, \frac{1_{\frac{2}{3}}^2}{a}, \frac{1_{\frac{2}{3}}^2}{\frac{2}{3}}$	
$\frac{1_{\frac{2}{3}}^2}{\frac{2}{3}}$	-	$\frac{p_{\frac{2}{3}}^2}{\frac{2}{3}}, \frac{p_{\frac{2}{3}}^2}{\frac{2}{3}}$
$\frac{1_{\frac{2}{3}}^2}{a}$	-	$\frac{p_{\frac{2}{3}}^2}{a}$
$\frac{1_{\frac{2}{3}}^2}{\frac{2}{3}}$	-	$\frac{p_{\frac{2}{3}}^2}{\frac{2}{3}}, \frac{p_{\frac{2}{3}}^2}{\frac{2}{3}}, \frac{p_{\frac{2}{3}}^2}{a}$
$\frac{p_{\frac{2}{3}}^2}{\frac{2}{3}}$	$\frac{1_{\frac{2}{3}}^2}{\frac{2}{3}}$	-
$\frac{p_{\frac{2}{3}}^2}{a}$	-	-
$\frac{1_{\frac{2}{3}}^2}{\frac{2}{3}}$	-	-

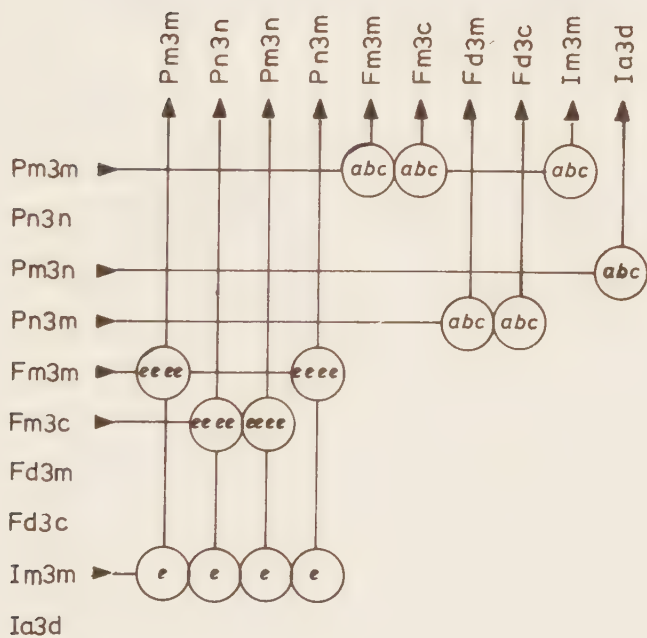
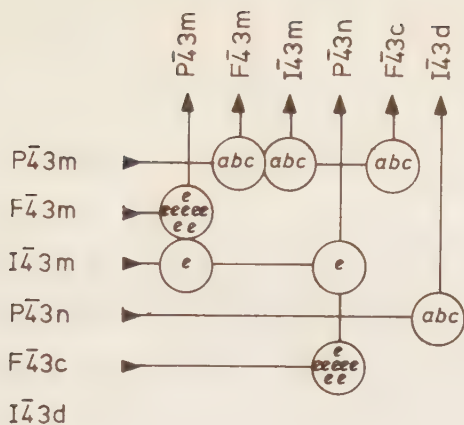
	abc	(4n+3)abc	e
p_{432}	I_{432}, F_{432}	-	-
I_{432}	-	-	p_{4_232}, p_{432}
F_{432}	-	-	p_{4_232}, p_{432}
p_{4_232}	I_{4_132}, F_{4_132}	-	-
I_{4_132}	-	-	p_{4_132}, p_{4_332}
F_{4_132}	-	-	p_{4_132}, p_{4_332}
p_{4_132}	-	p_{4_332}	-
p_{4_332}	-	p_{4_132}	-

	abc	e
$P\bar{4}3m$	$I\bar{4}3m, F\bar{4}3m, F\bar{4}3c$	-
$I\bar{4}3m$	-	$P\bar{4}3m, P\bar{4}3n$
$F\bar{4}3m$	-	$P\bar{4}3m$
$F\bar{4}3c$	-	$P\bar{4}3n$
$P\bar{4}3n$	$I\bar{4}3d$	-
$I\bar{4}3d$	-	-

	abc	e
$Pm3m$	$Im3m, Fm3m, Fm3c$	-
$Im3m$	-	$Pm3m, Pn3m, Pm3n, Pn3n$
$Fm3m$	-	$Pm3m, Pn3m$
$Fm3c$	-	$Pm3n, Pn3n$
$Pn3m$	$Fd3m, Fd3c$	-
$Pm3n$	$Ia3d$	-
$Pn3n$	-	-
$Fd3m$	-	-
$Fd3c$	-	-
$Ia3d$	-	-



Sequenzmatrix von 13 m3 und 431



Adjazenzmatrizen von $\bar{4}3m$ und $m3m$

Zusammenfassung

In dieser Arbeit werden die kristallographischen Punktgruppen als Untergruppen der Holoedrien abgeleitet. Die Herleitung erfolgt in einem analytischen Verfahren auf dem Weg über die symmetrischen Sorten der Wirkungsbereiche.

Anschließend wird gezeigt, daß man alle Raumgruppen als maximale klassengleiche Untergruppen der Gittergruppen auffinden kann.

Es wird ein Verfahren angegeben, nach dem man alle maximalen inäquivalenten klassengleichen Untergruppen ableiten kann.

Diese Ableitung wird im letzten Abschnitt vollständig durchgeführt.

LITERATUR

BURZLAFF, H.

Zur Beschreibung der Raumgruppen
Die Raumgruppen des triklinen, monoklinen und orthorhombischen
Systems
(unveröffentlicht)

DELAUNAY, B.

Neuere Darstellung der geometrischen Kristallographie
Z.Krist. 84, 109 (1932)

HERMANN, C.

- Zur systematischen Strukturtheorie
- I. Eine neue Raumgruppensymbolik
Z.Krist. 68, 257 (1928)
 - II. Ableitung der 230 Raumgruppen aus ihren Kennvektoren.
Z.Krist. 69, 226 (1928)
 - III. Ketten- und Netzgruppen.
Z.Krist. 69, 250 (1928)
 - IV. Untergruppen
Z.Krist. 69, 533 (1929)

KUROSCH, A. G.

Gruppentheorie
Berlin (1953)

LOMONT, J. S.

Applications of Finite Groups
New York, London (1959)

MAGNUS, W., KARRAS, A. und SOLITAR, D.
Combinatorial Group Theory.
New York, London, Sydney (1966)

NEUBOSER, J., WONDRAUSCHEK, H.
[1] Untergruppen der Raumgruppen
Kristall und Technik 36, 529 (1966)
[2] Untergruppentabellen. (unveröffentlicht)

SCHOENFLIES, A.
Theorie der Kristallstruktur
Berlin (1923)

ZIMMERMANN, H. und BURZLAFF, H.
Zur Definition des Punktlagen- und Gitterkomplex-Begriffes
Z.Krist. 139, 252 (1974)

Lebenslauf

Am 1. Mai 1945 wurde ich, Helmuth Zimmermann, als dritter Sohn des Ingenieurs Walter Zimmermann und seiner Ehefrau Anneliese, geb. Jansen, in Limbach/Sachsen, Kreis Chemnitz, geboren. Von 1951 bis zur Übersiedlung in die Bundesrepublik 1955 besuchte ich die Grundschule in Limbach, danach in Villingen/Schwarzwald, anschließend die Gymnasien in Stuttgart, Korntal (Württ.) und Gelnhausen, wo ich 1965 die Reifeprüfung ablegte. Nach einem Werksemester im Rahmen des Evang.Studienwerks begann ich im Wintersemester 1965/66 das Studium der Mathematik in Erlangen. Nach einem zweisemestrigen Studium in Heidelberg 1968 legte ich 1972 die Diplom-Prüfung für Mathematiker in Erlangen ab. Seit November 1972 bin ich am Lehrstuhl für Kristallographie tätig und befasse mich vorwiegend mit Fragen der Symmetrietheorie. Am 20. September 1975 heiratete ich die Textilingenieurin Maria geb. Ulbricht.

Copy-Center 2000

852 ERLANGEN · Obere Karlstr. 30
Tel. 09131-26197